

---

# **TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI**

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: B2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 1802R022 – Informatika a logistika

## **Řešení a vyhodnocení modelové úlohy proudění s nehomogenní hustotou**

## **Solution and evaluation of benchmark problem of the variable density flow**

### **Bakalářská práce**

Autor: **Lukáš Tannert**

Vedoucí práce: Doc. Ing. Milan Hokr, Ph.D.

**V Liberci 16. 5. 2008**



## Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé bakalářské práce a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé bakalářské práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom toho, že užít své bakalářské práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

Datum: 16. 5. 2008

Podpis:

## **Poděkování**

V této části bych chtěl poděkovat všem, kteří mi při přípravě a zpracování této práce pomáhali. Poděkování patří především Doc. Ing. Milanu Hokrovi, Ph.D., který mě zasvětil do problému modelování transportu látek, naučil mě zpracovávat získaná data a následně z nich vypracovat vyhodnocení. Chtěl bych poděkovat také kolegům, kteří se podobnému problému věnovali a s nimiž jsem mohl leckteré věci konzultovat.

## **Anotace**

Tato bakalářská práce se zabývá problematikou modelování úloh proudění a transportu látek s nehomogenní hustotou v porézním prostředí. Cílem bylo vyzkoušet a porovnat softwary pro modelování těchto úloh různými metodami na určité lokalitě při dosazení různých parametrů (hustota, okrajové a počáteční podmínky, apod.) a dále vyhodnotit vliv těchto parametrů, zda se například potvrdí předpoklad, že těžší roztok vlivem gravitace klesá dolů. Dosažené výsledky byly porovnávány pomocí grafů profilů koncentrace kontaminantu a pomocí izolinií rozložení koncentrace ve svislém řezu v koncovém čase.

Ukázalo se, že model je velmi citlivý na zjemnění sítě i na zjemnění intervalu času. Ke konvergenci ke správným výsledkům dochází při dostatečném časovém zjemnění intervalu. U prostorového zjemnění se podařilo ověřit, že ke konvergenci dochází pouze v úlohách s menším vlivem hustoty. Stejně závěry se projevíly také při srovnání různých programů, kde největší shody bylo dosaženo opět v úlohách s menším vlivem hustoty.

Klíčová slova: proudění, transport, modelování, Flow123D, Trang2004

## **Abstract**

This work deals with problems of variable density flow and transport in the porous media. The aim of the work was to test the software for simulation of these tasks by different methods at given site with variable parameters (density, boundary and initial conditions etc.) and to analyse the effect of these parameters. The achieved results were compared by means of graphs of profiles of the contaminant and through the use of isolines of contamination lay-out in the vertical cut in final time.

It appeared that the model is very sensitive to both, mesh and time refinement. For the convergence to correct results, we need sufficient time refinement of interval. Considering the space mesh refinement, there are correct results in tasks with smaller impact of density. Between various programs, the largest correspondence was in tasks with smaller impact of density too.

Keywords: variable density flow, transport, modelling, Flow123D, Trang2004

# Obsah

Anotace.....	5
Obsah.....	6
Úvod.....	7
1. Fyzikální problematika modelu .....	8
1.1 Vlastnosti prostředí.....	8
1.2 Hydrogeologické struktury.....	9
1.3 Proudění .....	10
1.4 Vlivy gravitace a hustoty.....	11
1.5 Transport rozpuštěné látky .....	12
1.6 Okrajové podmínky pro proudění a transport .....	13
2. Použitý software.....	15
2.1 Flow123D.....	15
2.2 TranG2004.....	16
2.3 FEFLOW .....	18
2.4 GMS 5.0 .....	18
3. Modelová úloha.....	21
3.1 Popis reálného prostředí.....	21
3.2 Diskretizace modelu.....	22
3.3 Okrajové podmínky .....	22
3.4 Materiálové parametry .....	23
3.5 Počáteční podmínky.....	24
3.6 Varianty modelových úloh .....	25
4. Vyhodnocení výsledků .....	26
4.1 Způsoby vyhodnocení .....	26
4.2 Vliv parametrů na úlohu.....	27
4.3 Vliv prostorového zjemnění .....	30
4.4 Vliv změny geometrie diskretizace.....	35
4.5 Vliv časového zjemnění .....	37
4.5.1 Krátký úsek (2 400 dnů) .....	37
4.5.2 Dlouhý úsek (36 000 dnů) .....	42
4.6 Analýza počtu iterací implicitní metody .....	44
4.7 Porovnání softwarů .....	46
Závěr .....	47
Literatura .....	48
Přílohy .....	49

## Úvod

Modelování fyzikálních a chemických procesů je v dnešní době nezbytným předpokladem pro řešení rozsáhlých projektů, které mají za úkol objasnit reálné přírodní procesy a cykly. Těchto poznatků se pak v tomto oboru využívá při řešení ekologických problémů z minulých let nebo při zavádění nových systémů a struktur v technických a průmyslových odvětvích. Modelování proudění a transportu látek se typicky využívá při sanaci rozsáhlých území zamořených kontaminanty, jež vznikala při těžbě nerostů nebo nadměrném využívání chemických látek v rostlinné a živočišné výrobě. V technické praxi se s modelováním jevů v podzemních vodách setkáváme při stavbě vodohospodářských děl, jako jsou přehrady, tunely apod.

Při modelování je nejprve nutné znát reálnou strukturu území s uvažováním možných odchylek, s kterými se později musí počítat. Informace o struktuře jsou však dost omezené, protože procesy probíhají často v rozsáhlých územích. Dalším předpokladem je znalost fyzikálních a matematických zákonitostí, které jsou provázány s celým procesem modelování. Hlavní motivací modelování je předpovídání chování systému v budoucnosti, protože se většinou jedná o záležitost trvající několik desítek let. Výsledné simulační modely by se tak měly co nejvíce přibližovat reálným podmínkám a měly by nám co nejvěrohodněji popisovat proudění podzemních vod, transport rozpuštěných látek horninovým prostředím a to za různých počátečních podmínek a s různými parametry (hustota látek, koncentrace kontaminantu apod.).

Modelování proudění a transportu látek v této práci znamená sestavení počátečních vstupních souborů, využití softwaru pro simulaci a interpretaci a vyhodnocení výsledků této simulace. Modelová úloha schematizuje lokalitu Stráže pod Ralskem. Skládá se ze dvou zvodní s rozdílnými tlaky oddělených poloizolátorem. Hlavním cílem je otestovat vlivy gravitace (např. klesání těžšího roztoku ke dnu) a hydraulických sil (vliv rozdílu hladin) na modelu na různých časových intervalech a při různém numerickém zjemnění tohoto modelu.

# 1. Fyzikální problematika modelu

Cílem této kapitoly je nastínění vlastností horninového prostředí a shrnutí rovnic a zákonitostí, které řídí modelované procesy. Kapitola je rozdělena do pěti částí, v první a druhé jsou popsány vlastnosti reálného podzemního prostředí, ve třetí je popsáno proudění kapaliny s nehomogenní hustotou v porézním prostředí, čtvrtá pojednává o vlivech gravitace a hustoty. V páté je popsán transport látek. Poslední, šestá část, je věnována počátečním podmínkám pro proudění a transport.

## 1.1 Vlastnosti prostředí

Horninové prostředí je nehomogenní a často velmi různorodé a anizotropní. Hornina se skládá z pevné fáze a z volného prostoru, což mohou být pukliny, póry a další dutiny, které mohou být zaplněny vodou.

Struktura hornin je různá, například nezvětralé krystalické horniny obsahují různě velká minerální zrna, která jsou těsně uspořádána. Puklinový prostor zde vzniká při chladnutí magmatu nebo při jiných tektonických procesech. Póry se vyskytují v sedimentárních horninách, s výjimkou chemicky vzniklých sedimentů (vápenec). Propojení pórů či puklin vytváří rozmanitý systém kanálků. Proudění v porézním prostředí označujeme jako průlinové, proudění v puklinovém prostředí jako puklinové. Pro matematický popis proudění a transportu látek v podzemních vodách je definován reprezentativní elementární objem (REV) za účelem brát horninový masiv jako spojitě prostředí s určitými vlastnostmi. Velikost REV volíme vhodným způsobem tak, aby jeho objem byl výrazně menší než objem celé modelované oblasti. Zároveň ale musí být dostatečně velký na to, aby homogenizoval rozdílné vlastnosti drobných struktur, které již nejsou pro model tolik podstatné.

Vlastností charakterizujících horninové prostředí je mnoho (např. hydraulická vodivost, tepelná vodivost), nás však v modelových úlohách, které jsou předmětem této práce, zajímají především pórovitost a hydraulická vodivost.

**PÓROVITOST** je množství dutin v tělese, což odpovídá poměru mezi objemem volného prostoru a jednotkovým objemem (objemem tělesa). Někdy se do pórovitosti zahrnuje i prostor puklin. Slepé systémy pórových kanálů a puklin, které se nepodílejí na proudění, jsou významné z hlediska migrace rozpuštěných látek. Ty zde difundují právě mezi slepými póry a póry průtočnými, kterými proudí voda. Hovoříme tak o dvojí porozitě. Podle druhu pórů pak rozdělujeme části tělesa na mobilní (průtočné póry)



a imobilní zónu (slepé póry). Vlivem gradientu koncentrace se látka mezi zónami přesouvá až dojde k vyrovnání koncentrací v obou zónách.

**HYDRAULICKÁ VODIVOST** K odpovídá v izotropním prostředí koeficientu úměrnosti mezi spádem a tokem. Je závislá na vlastnostech kapaliny a charakteru horniny, v níž se kapalina pohybuje. Proto také vyšší pórovitost okamžitě neznamena vyšší propustnost. U jemnozrnných materiálů s velkou porozitou a velkým měrným povrchem se významně uplatňují molekulární síly bránící pohybu vody – propustnost je tak nižší než u hrubozrnných struktur.

## 1.2 Hydrogeologické struktury

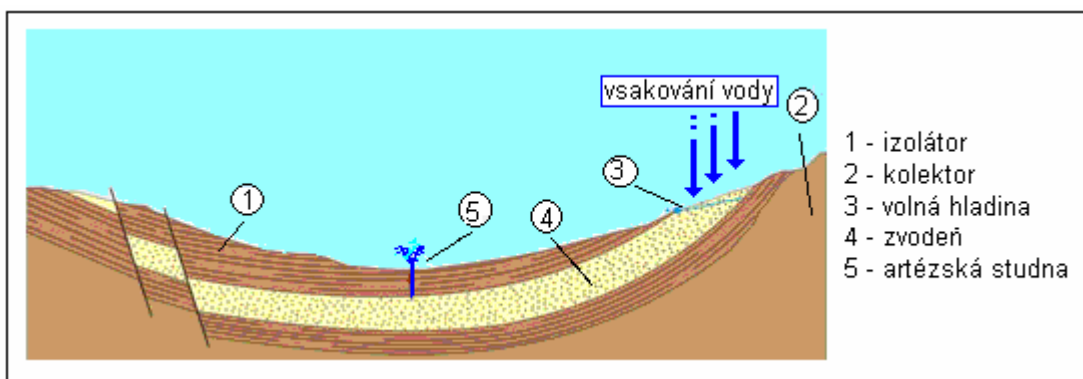
Hydrogeologická struktura je takové geologické prostředí, v němž dochází k pohybu a akumulaci podzemní vody. Je složena z jednoho nebo více kolektorů. Kolektorem se rozumí propustná vrstva či souvrství, ve kterém se může hromadit a relativně snadno pohybovat voda. Těleso, které tvoří podzemní voda v zóně nasycení se označuje zvodeň.

### Dělení kolektorů podle hladiny

**KOLEKTOR S VOLNOU HLADINOU** se povětšinou nachází přímo pod zemským povrchem, v lokalitách zasažených těžbou může být tento kolektor položen hlouběji pod zemským povrchem. Jak vyplývá z označení kolektoru, zvodeň je v tomto případě ohraničena volnou hladinou, nad kterou se nachází volný prostor naplněný plynem (vzduchem, vodními parami).

**KOLEKTOR S NAPJATOU HLADINOU** je zdola i shora ohraničen izolátory a tudíž se většinou jedná o hlubší kolektor. Všechny volné prostory jsou zaplněny vodou a proudění v tomto kolektoru se označuje jako nasycené. Při navrtání izolátoru vystoupá hladina na úroveň nazývanou piezometrická výška. Pokud voda vystoupí nad okolní terén, označujeme ji jako artézskou zvodeň. Pomocí dostatečného počtu bodů lze zkonstruovat piezometrickou plochu, která charakterizuje tlakové poměry ve zvodni.

Na vlastnostech a velikosti akumulačních oblastí závisí doba zdržení vodního tělesa při průchodu podzemím. Ve složitých strukturách se potom jednotlivé částice obsažené ve vodním tělese mohou zdržet mnohem déle než ve strukturách jednodušších. Je-li ve zkoumané oblasti více kolektorů, jsou odděleny izolátory. Izolátory jsou nepropustné horniny. Nepropustná hornina však neexistuje, jen kolektor je významně propustnější než izolátor. Izolátor tedy brání volnému přetoku kapaliny mezi kolektory.



Obr. 1.1: Typická konfigurace hydrogeologické struktury.

Tlak v jednotlivých kolektorech je z tohoto důvodu rozdílný a jeho projevem je ve zvodních s napjatou hladinou piezometrická výška a ve zvodních s volnou hladinou poloha hladiny. Při takto vzniklém spádu dochází k mezikolektorovému přetoku. V lokálním měřítku by přetok mohl být zanedbatelný, v rozsáhlých oblastech však může docházet k významnému přetoku a to především skrz poloizolátor, izolátor narušený např. vulkanickou činností nebo, v případě lokality Stráž pod Ralskem, lidskou činností – těžbou uranu.

Nad hladinou pozemní vody se nachází kapilární zóna a jsou-li póry této zóny jemnější, kapilární vztlínání je větší. Se vzdáleností od hladiny však klesá nasycení. Nad touto zónou se ještě nacházejí podpovrchový kolektor, který je již spjat s povrchovými vodami, a zóna půdní vody, která se vsakuje (infiltrace), odpařuje (evaporace) nebo ji využívají rostliny k transpiraci. Je-li vzdálenost podzemních vod od povrchu příliš dlouhá, nachází se mezi půdní a kapilární zónou přechodné pásmo obsahující vázanou vlhkost (hydroskopické a kapilární síly).

### 1.3 Proudění

Proudění roztoku s nehomogenní hustotou v porézním prostředí [2] je popsáno Darcyho zákonem a rovnicí bilance hmoty. Proměnlivě nasyceným porézním prostředím budeme rozumět území se saturovanou i nesaturovanou zónou.

## Darcyho zákon

Rovnicí pro filtrační proudění podzemní vody udávající vztah mezi hnacími silami a tokem je Darcyho zákon. Má tvar:

$$(1) \quad \mathbf{u} = -\frac{\mathbf{k}(S)}{m}(\nabla p + r g \nabla z),$$

kde  $\mathbf{u}$  je objemový tok (darcyovská rychlost),  $\mathbf{k}(S)$  tenzor vodní propustnosti porézního prostředí,  $S$  saturace,  $\mu$  dynamická viskozita,  $\rho$  hustota,  $p$  tlak,  $g$  gravitační zrychlení a  $z$  svislá vzdálenost od referenční roviny.

Zavádíme dále piezometrickou výšku  $h$ , která je dána vztahem:

$$(2) \quad h = \frac{p}{r_0 g} + z,$$

kde  $r_0$  je referenční hustota kapaliny. Piezometrická výška je tedy výška vodního sloupce, odpovídající tlaku v daném místě.

## Rovnice bilance hmoty

Obecně lze rovnice bilance hmoty vyjádřit takto:

$$(3) \quad \frac{\partial(rnS(p))}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{ru}) = q r.$$

Zde  $q$  značí hustotu zdrojů,  $n$  porozitu a  $S$  saturaci.

## 1.4 Vlivy gravitace a hustoty

Hustotu lze považovat za funkci koncentrace, teploty a tlaku. V modelových úlohách se však uvažuje pouze závislost hustoty na koncentraci, která má v těchto úlohách hlavní vliv. Hustotu v závislosti na koncentraci lze vyjádřit takto:

$$(4) \quad \rho(c) = \rho_0 e^{\frac{\bar{\alpha}}{c_s - c_0}(c - c_0)},$$

kde  $\rho_0$  je referenční hustota,  $c_s$  maximální koncentrace,  $c_0$  referenční koncentrace

(obvykle  $c_0 = 0$ ) a  $\bar{\alpha} = \frac{\rho(c_s) - \rho_0}{\rho_0}$  koeficient roztažnosti roztoku.

Vztah (4) je možno linearizovat:

$$(5) \quad \rho(c) = \rho_0 \left[ 1 + \frac{\bar{\alpha}}{c_s - c_0}(c - c_0) \right] = \rho_0 [1 + \nabla(c)]$$

a  $\bar{\alpha}$  považovat za konstantu. Dosazením předchozího vztahu (5) do (1) a zavedením

tenzoru hydraulické vodivosti  $\mathbf{K}(S) = \frac{\mathbf{k}(S)r_0 g}{m}$  po úpravě dostáváme

$$(6) \quad \mathbf{u} = -\mathbf{K}(S)[\nabla h + (1 + \Delta(c))\nabla z]$$

## Oberbeck-Boussinesquova aproximace

Rovnici bilance hmoty upravíme pro případ nehomogenní hustoty. Budeme uvažovat plně saturované prostředí a vztah (5) dosadíme do rovnice (3) a namísto tlaku použijeme piezometrickou výšku:

$$(7) \quad r(c) \frac{dq(h)}{dh} \frac{\partial h}{\partial t} + r(c) \nabla \cdot \mathbf{u} = q r(c) - q(h) r_0 \frac{\bar{a}}{c_s - c_0} \frac{\partial c}{\partial t} - r_0 \frac{\bar{a}}{c_s - c_0} \mathbf{u} \nabla c$$

Dostali jsme tzv. rovnici v úplném tvaru. Použijeme zjednodušení označované jako Oberbeck-Boussinesquova aproximace [1], kdy zanedbáme poslední dva členy na pravé straně rovnice a dostaneme výslednou rovnici bilance hmoty ve tvaru:

$$(8) \quad \frac{dq(h)}{dh} \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = q,$$

kde  $q$  je vodní obsah a  $\frac{dq(h)}{dh} = \chi$  pružná zásobnost.

## 1.5 Transport rozpuštěné látky

Transport látky v kapalině je časovou změnou rozložení látky v prostoru. Tento transport bez chemických reakcí a dalších vzájemných působení s vlivem na výslednou polohu látky (tzv. konzervativní transport) je řízen dvěma základními mechanismy. Jedná se o advekci (nazývaná také jako konvekce) a hydrodynamickou disperzi.

### Advekce

Advekce je pohyb rozpuštěné látky způsobený pohybem celého roztoku. Kapalina se pohybuje určitou rychlostí, unáší s sebou látku, a proto je koncentrace v různých časových krocích v jednotlivých místech stejná, s ohledem na dráhový posun kapaliny. Úbytek koncentrace látky za jednotku času v určitém místě je roven koncentraci, která z tohoto místa odtekla rychlostí  $\mathbf{v}$ .

### Difuzně-disperzní děje

Difuzně disperzní děje jsou takové, kdy dochází k pohybu rozpuštěné látky vlivem gradientu koncentrace transportované látky. Dochází tak k přesunu rozpuštěné látky z míst s vyšší koncentrací do míst s nižší koncentrací. V porézním prostředí rozlišujeme molekulární difuzi a mechanickou disperzi. Molekulární difuze je samočinný mikroskopický děj, kdy za pomoci tepelného pohybu částic dochází k přenosu látky proti směru gradientu její koncentrace (postupně se v soustavě vyrovnávají koncentrace). Mechanická disperze je makroskopický děj ovlivněný

stavbou horniny, kde v některých místech je vlivem nehomogenní pórovitosti proudění kapaliny pomalejší.

Modelovou úlohu pro transport většinou skládáme z obou dějů (advekce a hydrodynamická disperze), protože jsou v reálných podmínkách konány současně. Z toho plyne, že i výsledná rovnice bude složena z obou dějů a bude vypadat takto:

$$(9) \quad \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}c) - \nabla \cdot (D_h \nabla c) = 0,$$

kde  $D_h$  je hydrodynamická disperze a  $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}}{n}$ .

### Pécletovo číslo

Předchozí rovnice (9) je parabolická a pro různé koeficienty difuze a různé rychlosti se chová rozdílně. Z tohoto důvodu je zavedeno tzv. Pécletovo číslo definované vztahem:

$$(10) \quad Pe = \frac{vL}{D},$$

kde  $L$  označuje charakteristickou délku, nebo-li charakteristický rozměr úlohy.

Pécletovo číslo nám udává, jestli bude v modelové úloze převaha difuzně-disperzních dějů nebo advekce. Je-li malé, převažují difuzně-disperzní děje, je-li velké, převažuje advekce.

## 1.6 Okrajové podmínky pro proudění a transport

### Podmínky pro proudění

Dirichletova podmínka pro proudění zadává tlakovou výšku, jež píšeme:

$$(11) \quad h = h_D$$

Pokud je známa velikost toku přes část hranice, použijeme Neumannovu podmínku:

$$(12) \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_N$$

kde  $\mathbf{n}$  je jednotkový vektor normály k hranici v daném místě. Někdy se vyskytne případ, kdy je část hranice polopropustná. Potom volíme obecnou Newtonovu podmínku:

$$(13) \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \sigma(h - h_D) = u_N$$

kde  $\sigma$  je koeficient přestupu vyjadřující propustnost hranice a  $h_D$  je velikost tlakové výšky na vnější hranici. Newtonovou podmínkou lze vyjádřit i obě předchozí: Dirichletovu pro  $\sigma = \infty$  a Neumannovu pro  $\sigma = 0$ .

### Podmínky pro transport

Je-li na části hranice známá hodnota koncentrace, volíme Dirichletovu okrajovou podmínku:

$$(14) \quad c = c_D,$$

kde  $c_D$  je zadaná funkce.

V případě advekčně-disperzního transportu se Neumannova podmínka uplatní pouze v případě, kdy je zadán pouze disperzní tok:

$$(15) \quad (n\mathbf{D}_h \nabla c^I) \cdot \mathbf{n} = j_N,$$

U úloh s dominantní konvekcí se na výtoku z oblasti většinou volí homogenní Neumannova podmínka, která charakterizuje stav, kdy jsou jednotlivé složky roztoku z oblasti vynášeny pouze vlivem konvekce.

Na zbývajících částech hranice zadáváme obecnou Newtonovu podmínku:

$$(16) \quad (c^I \mathbf{u} - n\mathbf{D}_h \nabla c^I) \cdot \mathbf{n} = j_C,$$

kde  $j_C$  je celkový hmotnostní tok rozpuštěné látky.

## 2. Použitý software

Pro řešení modelových úloh byl v této bakalářské práci použit především modelovací software Flow123D. Dále byly použity programy TranG2004 a FEFLOW. Původně bylo plánováno také testování úloh v programu GWS 5.0, ale vzhledem k potřebě otestovat software Flow123D a nefunkčnosti GWS na testovaných úlohách, jím byl GWS nahrazen. V následujících podkapitolách jsou uvedeny specifikace výše zmíněných softwarů.

### 2.1 Flow123D

Flow123D je software vyvíjený od roku 2004 na Technické univerzitě v Liberci pro modelování podzemních procesů a otestování nových metod ve výpočtech. Jeho autory jsou Otto Severýn a Miloslav Tauchman, s přispěním M. Hokra, J. Královcové a J. Kopala.

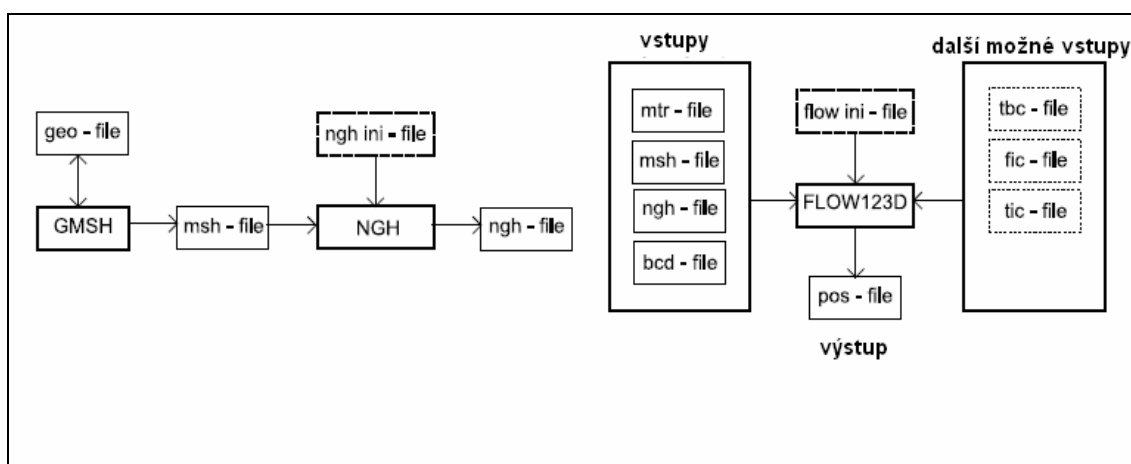
Simulační software Flow123D je naprogramovaný v jazyce C v prostředí Borland C++ Builder 6.0 a umožňuje řešit úlohy podzemního proudění vody v heterogenním horninovém prostředí, transportu rozpuštěných látek a jejich interakce s tímto prostředím. Jedná se o tzv. multidimenzionální model a je podporováno ustálené i neustálené proudění s nehomogenní hustotou. Výpočty jsou možné na pravidelných a nepravidelných sítích. Transport rozpuštěných látek je řešen metodou konečných objemů - rozkladem operátoru. Proudění je řešeno metodou konečných prvků. Úlohy v tomto programu lze počítat explicitně i implicitně.

#### Vstupní a výstupní data ve Flow123D

Vstupní a výstupní soubory v programu Flow123D (obr. 2.1) jsou textové. Řídícím souborem je soubor INI, kde jsou uvedeny odkazy na všechny vstupy a výstupy programu a v němž se nacházejí další nastavení programu (hustota, celkový čas výpočtu, krokování atd.). Základem sestavení úlohy je definice oblasti. Ta se rozdělí numerickým dělením na malé elementy, provede se diskretizace modelu. Výpočty se pak provádějí na těchto elementech, které jsou v souboru MSH (definice sítě). Ten lze automaticky vygenerovat pomocí programu GMSH (veřejně šířitelný software podle licence GNU GPL [7]). MSH obsahuje seznam uzlů sítě, jejich souřadnice a seznam elementů, v našem případě trojúhelníkových elementů charakterizovaných třemi uzly. Dalšími soubory jsou NGH (soubor s mezivýsledky), soubor MTR s definicí materiálů modelu a jejich vlastnostmi, BCD s okrajovými podmínkami proudění, TBC

s okrajovými podmínkami transportu. V souboru ICD jsou definovány počáteční podmínky transportu.

Jako výstup generuje Flow123D soubor POS, který je vlastním formátem GMSH (zobrazuje většinu spočtených výstupů programu – piezometrickou výšku, koncentraci v čase, obr. 2.5), dále pak textové soubory TMP obsahující výsledky celé oblasti po časech, soubor LOG zobrazující informace o průběhu výpočtu. Posledním výstupem je soubor CS, který obsahuje závislost koncentrace na čase v konkrétně nastaveném profilu (zadáva se v INI).



Obr. 2.1: Schéma softwaru Flow123D – vstupní a výstupní soubory.

## 2.2 TranG2004

Druhým programem používaným k výpočtům v této práci je TranG2004, jehož kód je dílem V. Wasserbauera s přispěním M. Hokra pro potřeby společnosti DIAMO, s.p., Stráž pod Ralskem. Software umí modelovat několik procesů – ustálené proudění, neustálené proudění, transport. Kód je založen na speciální formulaci metody konečných prvků.

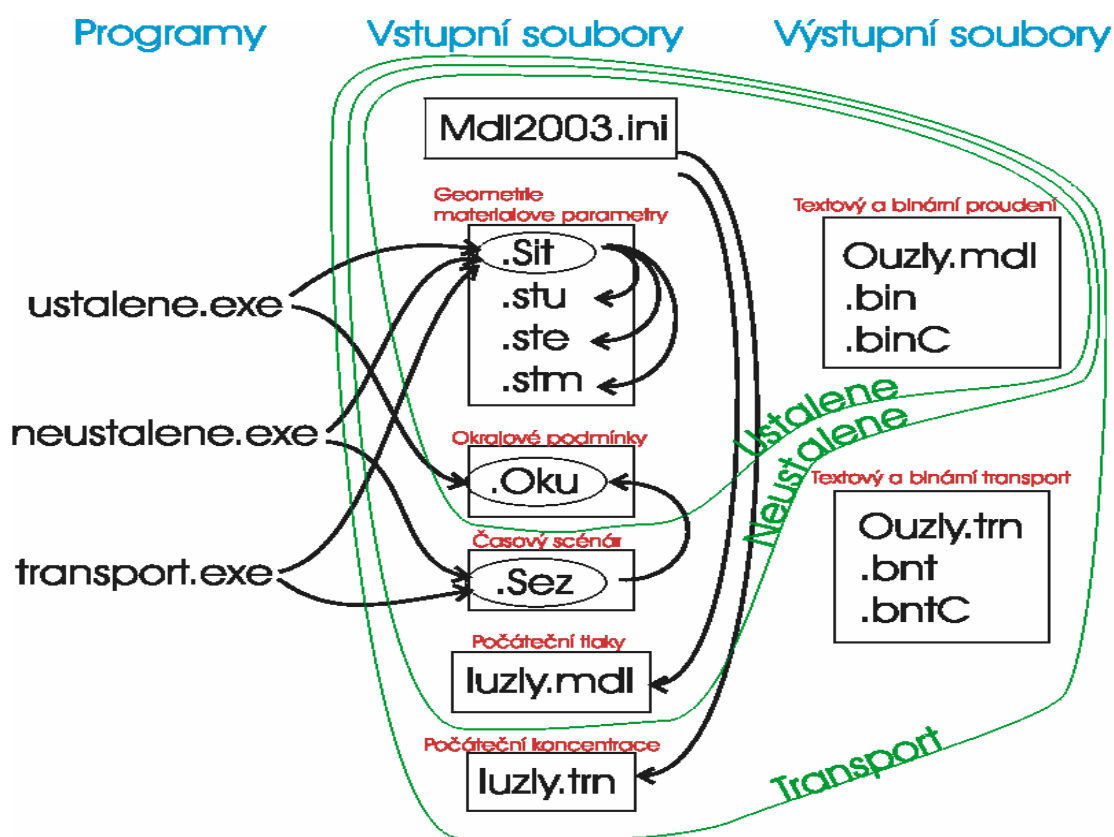
### Vstupní a výstupní data v TranG2004

Stejně jako v případě Flow123D jsou i zde hlavními vstupy soubory s definicí sítě. Jedná se o SIT, STU a STE. STU obsahuje definice uzlů, STE definice elementů a SIT oba soubory zastřešuje – obsahuje definiční data sítě, používané názvy vrstev, ploch a materiálů sítě atd. Dalšími vstupy úlohy jsou soubor poskytující informace o materiálu modelovaného prostředí STM, nastavení okrajových podmínek v souboru OKU, nastavení krokování a frekvence zápisu výstupních dat SEZ, soubor Mdl2003.ini



(nastavuje další parametry úlohy, hustotu, vlastnosti povrchu apod.) a soubory s definicí počátečního stavu koncentrací a tlaků iuzly .MDL a iuzly .TRN.

Výstupem programu TranG2004 jsou dva typy souborů – textové a binární. Textové jsou zastoupeny soubory ouzly.MDL (pro proudění) a ouzly.TRN (pro transport) obsahujícími informace o posledním kroku výpočtu. Dalším textovým souborem je MdlLog, ve kterém nalezneme informace o každém kroku výpočtu, a posledním je SumVrst, jenž obsahuje součty koncentrací ve všech bodech pro každou vrstvu v každém časovém kroku. Program generuje také 4 binární soubory, které se dají otevřít v GWS zobrazovacích programech (GWS View, autor V. Wasserbauer, viz. obr. 2.6). Zobrazují ustálené proudění (rozložení koncentrací), neustálené proudění a transport (animace transportu apod.).



Obr. 2.2: Schéma softwaru TranG2004 – vstupy a výstupy dat.

## 2.3 FEFLOW

Dalším použitým programem pro modelování je FEFLOW, produkt německé firmy WASY (celým názvem WASY Institute for Water Planning and Systems research Ltd.). První verze programu byla uvedena na trh v roce 1979.

FEFLOW je grafický nástroj pro modelování procesů v podzemních vodách v 2D a 3D. V softwaru je podporováno mnoho různých jevů (ustálené proudění, neustálené proudění, ustálený transport a další). Výpočty provádí metodou konečných prvků a je založen na zdrojovém kódu napsaném v programovacím jazyce ANSI C/C++.

### Vstupy a výstupy v FEFLOW

Jelikož se jedná o grafický program, síť a další nastavovací parametry (materiál, okrajové podmínky, počáteční podmínky) se nezadávají textově do různých souborů, ale nastavují se přímo v menu programu, který soubory následně zapíše. Síť i parametry je pak možno opětovně z těchto souborů načítat.

Výstupy si dokáže zobrazit samotný FEFLOW.



Obr. 2.3: Okno programu FEFLOW – nahoře Shell Menu, v levém pruhu se rozbalují podmenu, bílá je pracovní plocha.

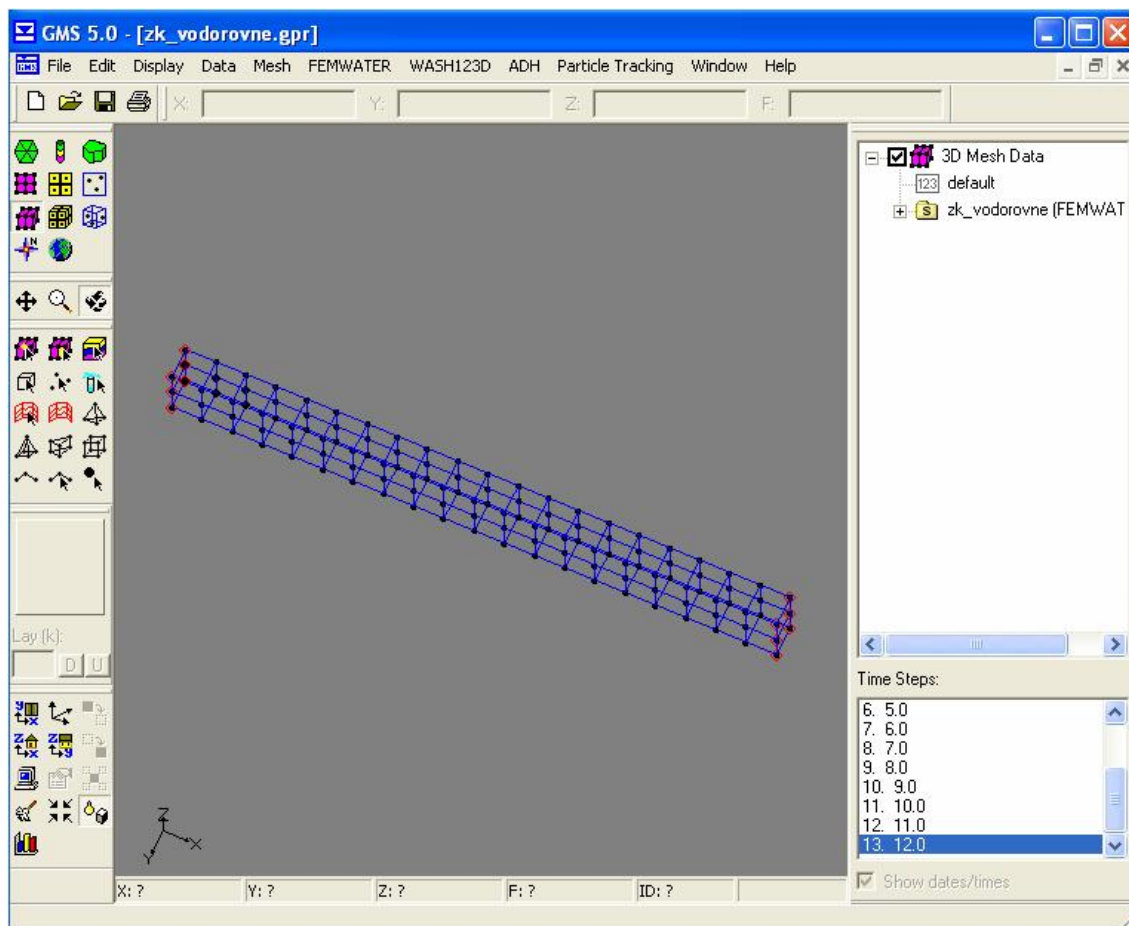
## 2.4 GMS 5.0

GMS (Groundwater Modeling System) je komerční software vyvíjený společností Environmental Modeling Systems, Inc., Utah, U.S.A. pro potřeby agentur vlády USA, jehož využití lze nalézt také v mnoha dalších zemích světa. GMS poskytuje komplexní nástroje pro všechny fáze modelování výskytu podzemních vod včetně

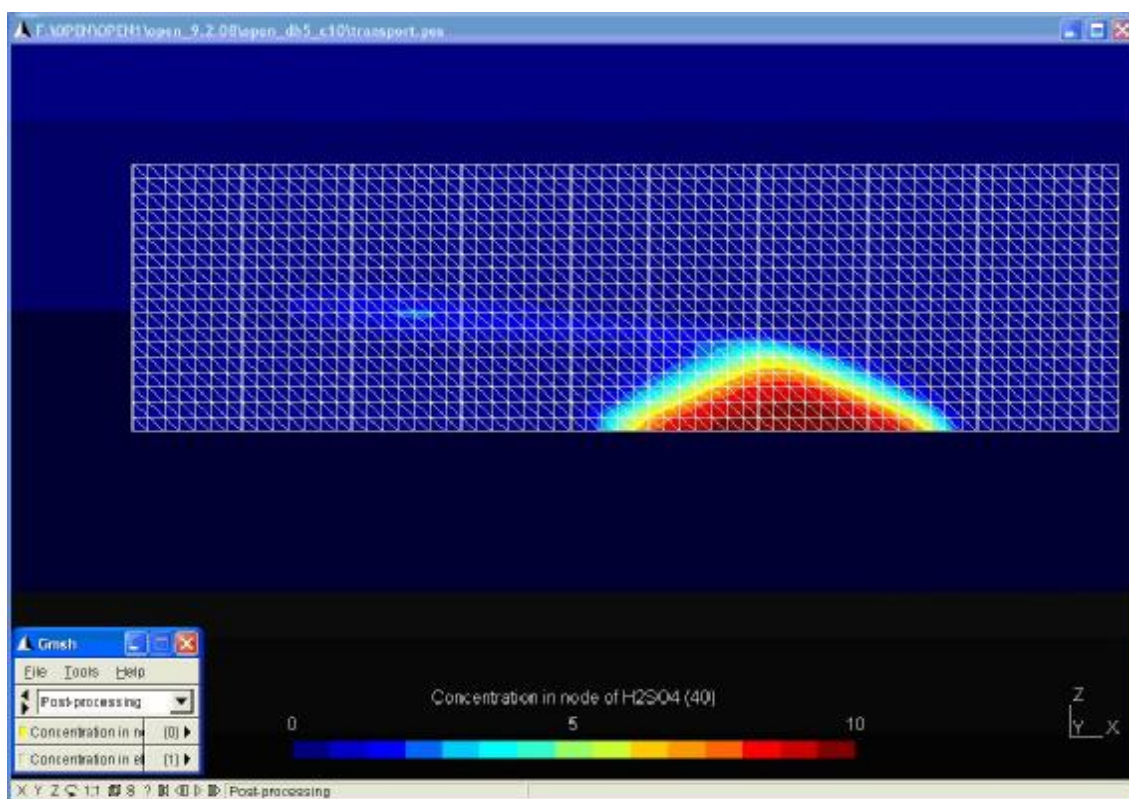
charakteristiky území, vývoje modelu, kalibrování, zpracování a následné vizualizace. Software podporuje různé modely ve 2D a 3D, MODFLOW 2000, MODPATH, MT3DMS/RT3D, SEAM3D, ART3D, UTCHEM, FEMWATER a dalších.

### Vstupy a výstupy v GMS 5.0

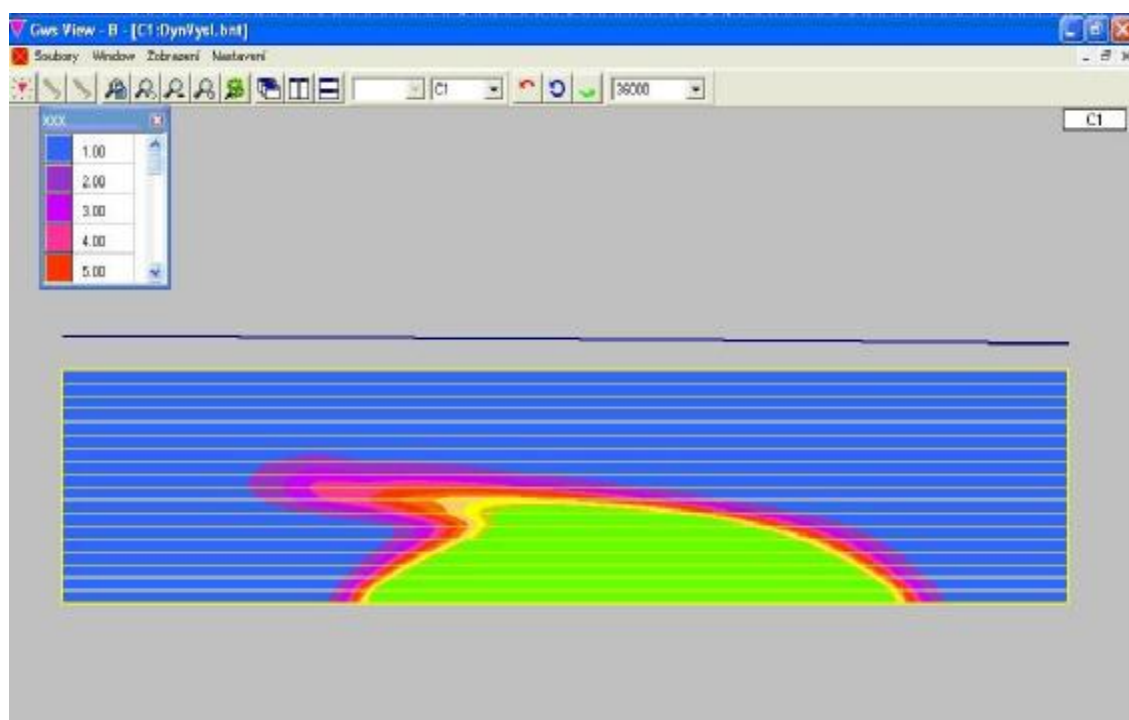
Pro účely BP připadalo v úvahu použití modulu FEMWATER (3D síť s parametry zadávanými v uzlech, což by se pro náš případ hodilo nejvíce) nebo MODFLOW (3D mřížka s parametry zadávanými ve stěnách). Stejně jako FEFLOW má i GMS grafické rozhraní, ve kterém se děje vše od vytvoření sítě, přes nastavení parametrů, až po výpis a vykreslení výsledků, které jsou programem zpracovány graficky nebo můžeme využít výstupních textových souborů, s jejichž daty se bohužel dále špatně pracuje (zpracovatelnost tabulkovým kalkulátorem).



Obr. 2.4: Okno programu GMS 5.0 – v levém sloupci vybíráme metodu rozčlenění modelu (uzly, mřížky) a nastavujeme např. okrajové podmínky, v horní liště pod položkou FEMWATER nastavujeme další parametry, v pravém sloupci jsou výstupy a časové kroky.



Obr. 2.5: Zobrazení výsledné koncentrace v programu GMSH.



Obr. 2.6: Zobrazení výsledné koncentrace v programu GWS View.

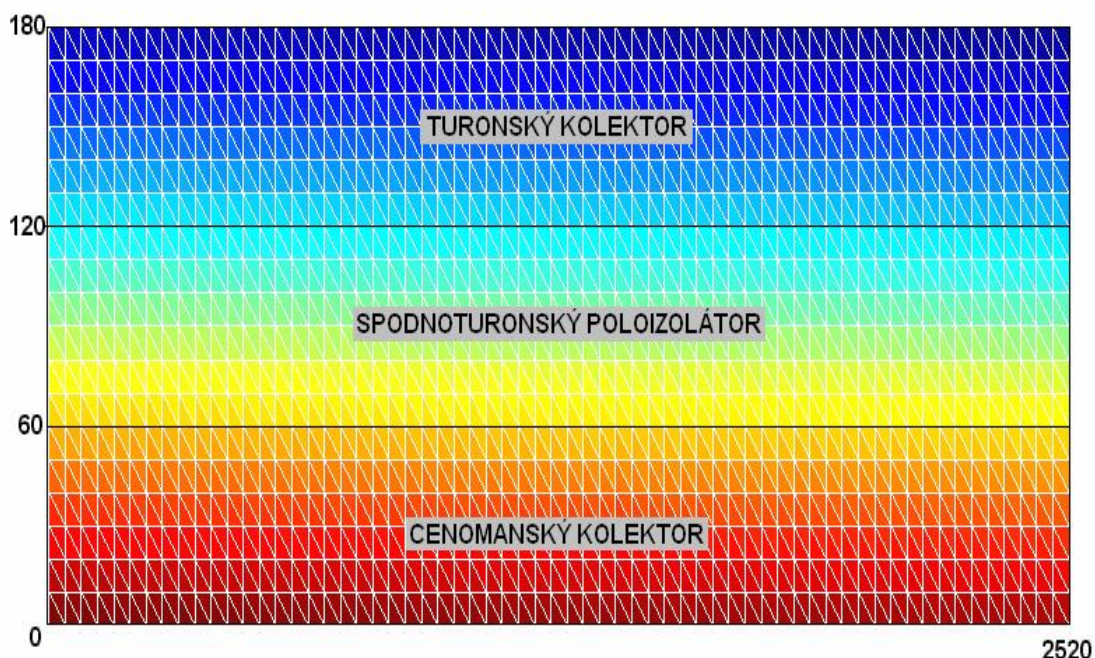


### 3. Modelová úloha

Modelové úlohy zjednodušují reálné podmínky lokality Stráž pod Ralskem a jejího okolí.

#### 3.1 Popis reálného prostředí

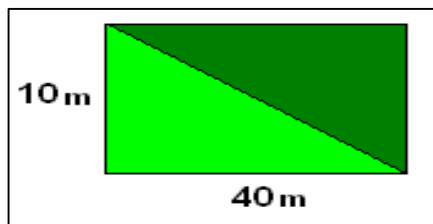
V lokalitě Stráž pod Ralskem, nacházející se v severočeské křídové pánvi, jsou dvě hlavní zvodně, dolní cenomanská a horní turonská. Obě zvodně, které jsou tvořeny různými druhy pískovců, jsou oddělené spodnoturonským poloizolátorem složeným z prachovů, slínovců a kalových vápenců. Těžba uranu loužením v oblasti Stráže zasáhla dolní okraj cenomanského kolektoru. Turonská zvodně slouží jako zdroj pitné vody. Modelová úloha má simulovat situaci dlouhodobého přesunu kontaminace z cenomanské do turonské zvodně přes poloizolátor, který je narušený vrty a tektonickými poruchami. Modelovou oblastí je svislý řez (2D model), o délce 2520 m (zleva doprava), s výškou 180 m (mocnost jednotlivých vrstev je 60 m). Vše znázorňuje obrázek 3.1. Výška přibližně odpovídá reálnému rozložení vrstev, délka byla zvolena vzhledem k možnostem softwaru (diskretizace, čas), zároveň dostatečně reprezentuje reálné prostředí.



Obr. 3.1: Geometrie úlohy – tři vrstvy po 60 m (turon, spodnoturonský poloizolátor, cenoman), rozměry roviny 2520 m (vodorovně) x 180 m (svisle)

### 3.2 Diskretizace modelu

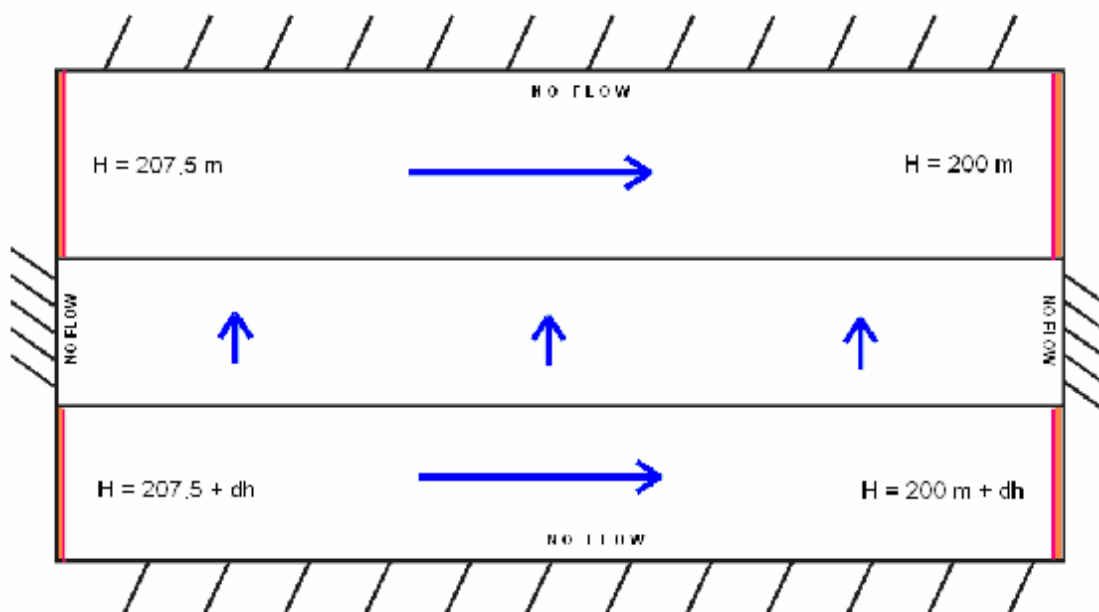
Numerická diskretizace celého modelu byla provedena pomocí trojúhelníků a to třemi způsoby. Prvním typem, označovaným jako nezjemněná síť (NZ), byla nejprve diskretizace úlohy pomocí obdélníků o rozměrech 10 x 40 m (výška x šířka), kde každý obdélník je navíc rozdělen na dva pravoúhlé trojúhelníky (viz obr. 3.2). Touto diskretizací vzniklo 18 vrstev. Další dva typy, označované jako zjemnění 1 (Z1) a zjemnění 2 (Z2), vznikly vždy půlením předchozího typu, Z1 bylo diskretizováno obdélníky 5 x 20 m, které byly rozděleny na dva pravoúhlé trojúhelníky, Z2 obdélníky 2,5 x 10 m, které byly opět rozděleny na dva pravoúhlé trojúhelníky. Rozložení do vrstev (nezjemněná síť NZ) a rozměry úlohy jsou patrné na obrázku 3.1.



Obr.3.2: Diskretizace trojúhelníky

### 3.3 Okrajové podmínky

Jsou definovány dva typy okrajových podmínek: předepsaná piezometrická výška (předepsaný tlak) na bočních stěnách zvodní a nulový tok na boční stěně izolátoru a dolní a horní stěně modelu. Tyto podmínky jsou nastaveny tak, aby generovaly základní rysy reálných hydraulických podmínek, tj. přirozený gradient v horizontálním směru v kolektorech a rozdíl piezometrické výšky (vertikální gradient) na poloizolátoru. Právě rozdíly hladin jsou jedním z faktorů ovlivňujících další chování úlohy a proto je v úlohách použito několik variant. Rozdíl hladin v metrech označíme  $dh$ , v úloze jsou použity hodnoty  $dh = 1, 3, 5, 10$ . Hodnoty předepsané piezometrické výšky jsou: na pravé straně turonu 200 m, na levé straně turonu 206 m, na levé straně cenomanu 206 m +  $dh$ , na pravé straně cenomanu 200 m +  $dh$  (viz obr. 3.3). Pro zjednodušení je celá oblast počítána jako saturovaná (nasycená), protože volná hladina v turonu nehraje pro studované jevy žádnou roli.



Obr. 3.3: Okrajové podmínky – nastavení rozdílu hladin  $dh$  a nulového toku (no flow).

### 3.4 Materiálové parametry

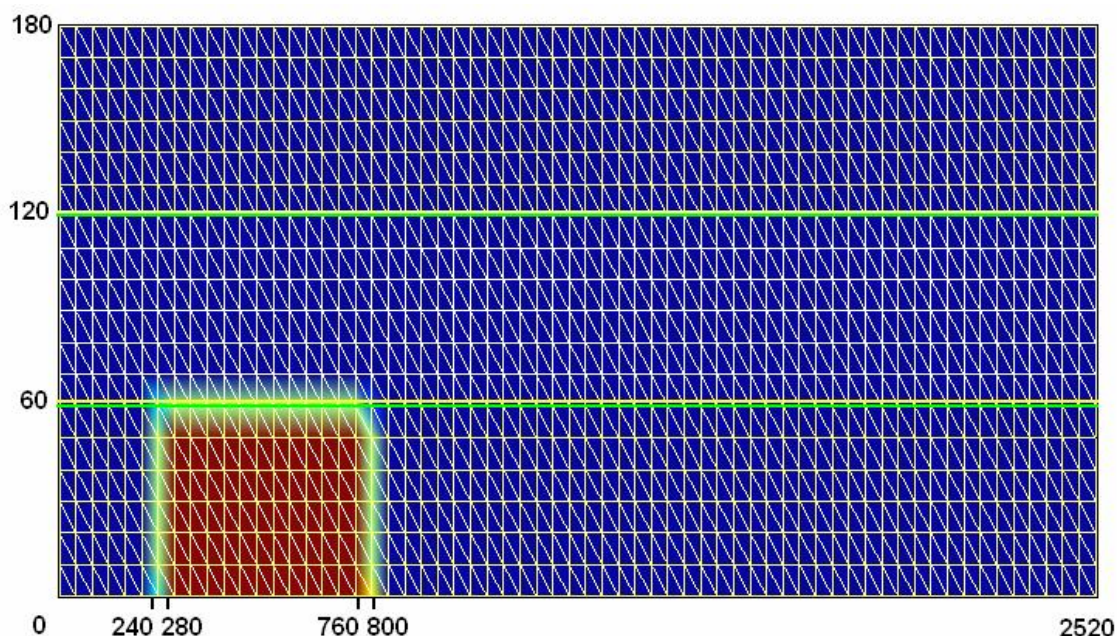
Použité materiálové parametry odpovídají průměrným hodnotám pro dané materiály v reálném prostředí. Na rozdíl od článku [3] z FM TUL a stejně jako v pracích [4] a [5] je zanedbána nehomogenita uvnitř kolektorů, neboť její vliv byl velmi složitý a cílem práce je zejména soustředění se na numerické vlastnosti. Vertikální nehomogenita mezi kolektory zůstala zachována, zatímco v horizontálním směru uvažujeme modelovou oblast jako homogenní. Seznam hodnot pro jednotlivé vrstvy je v tabulce 3.1.

	Izotropní hydraulická vodivost $K$ [m/den]	Porozita $n$ [1]	Molekulární difuze $D_m$ [m <sup>2</sup> /den]	Hydrodyn. disperzivita $\alpha$ [m]	Výška vrstvy [m]
Turonský kolektor	1	0,1	1e-9	L: 5 T: 0,5	60
Spodnoturonský poloizolátor	0,001	0,05	1e-9		60
Cenomanský kolektor	1	0,1	1e-9		60

Tabulka 3.1: Parametry materiálu.

### 3.5 Počáteční podmínky

Počáteční rozložení piezometrické výšky a rychlosti je dáno okrajovými podmínkami uvedenými v části 3.3, tj. jako odpovídající stacionární stav. Jako počáteční podmínku pro úlohu transportu (rozložení koncentrace) vezmeme přibližnou reprezentaci kontaminačního mraku v cenomanské zvodni – tj. danou nenulovou koncentrací v omezené oblasti cenomanu a nulovou koncentrací ve zbytku oblasti a v přitékající vodě. Pro lepší názornost uvažujeme jednu látku, např. reprezentující celkové rozpuštěné látky. Původně byla uvažována délka mraku 500 m, vzhledem ke geometrii sítě zadáváme koncentraci v délce 480 m, na okrajích této oblasti ještě navíc dochází k přechodu k nulové hodnotě, tj. nenulová koncentrace je zadána na 560 m (viz obr. 3.4). Přesná aproximace reálného tvaru mraku není nutná, protože během několika časových kroků dojde k rozptylu látky, rozmazání ostrých hranic mezi zadanou koncentrací a čistou vodou. Pro naše účely byla zadávána koncentrace  $c = 2 \text{ g/l}$ ,  $c = 10 \text{ g/l}$  a  $c = 50 \text{ g/l}$ .



Obr 3.4: Rozložení počáteční koncentrace – kontaminační mrak  
(nenulová koncentrace zadána v 560 metrech).



### 3.6 Varianty modelových úloh

K porovnávání výsledků mezi jednotlivými programy bylo sestaveno několik varianty úloh. Varianty se lišily různými kombinacemi vstupních podmínek a fyzikálních parametrů:

- Rozdíl hladin cenoman-turon, značený  $dh$ : 1 m, 3 m, 5 m, 10 m.
- Počáteční koncentrace v cenomanském kolektoru, značená  $c$ : 2 g/l, 10 g/l, 50 g/l.
- Nezjemněný model NZ, zjemněný model Z1 a Z2 (vysvětleno v kapitole 3.2).

Čas výpočtu byl stanoven na 100 let (pokud není uvedeno jinak, viz níže) a pro porovnání byl použit stav na konci výpočtu. Tento čas je pro naše modelové úlohy dostatečně reprezentativní a kontaminační mrak se za 100 let přesune z levé poloviny oblasti do pravé poloviny. Pro některé testovací výpočty programu Flow123D byl zadán kratší časový interval odpovídající 2400 dnů. V několika případech byly výpočty prováděny implicitní metodou (opět u Flow123D). Ve všech případech byla také nastavena velikost dílčích intervalů a tedy i počet kroků nutných k dosažení výsledného časového úseku (pro nezjemněnou úlohu NZ standardně 40 kroků délky 900 dnů). V následující tabulce 3.2 jsou označení variant platící pro všechny testované programy.

varianty	K [m/den]	dh [m]	$c_0$ [g/l]
<b>VarA1</b>	1e-3	1	10
<b>VarA2</b>	1e-3	3	10
<b>VarA3</b>	1e-3	5	10
<b>VarA4</b>	1e-3	10	10

varianty	K [m/den]	dh [m]	$c_0$ [g/l]
<b>VarB1</b>	1e-3	1	50
<b>VarB2</b>	1e-3	3	50
<b>VarB3</b>	1e-3	5	50
<b>VarB4</b>	1e-3	10	50

varianty	K [m/den]	dh [m]	$c_0$ [g/l]
<b>VarC1</b>	1e-3	3	2
<b>VarC2</b>	1e-3	5	2
<b>VarC3</b>	1e-3	10	2

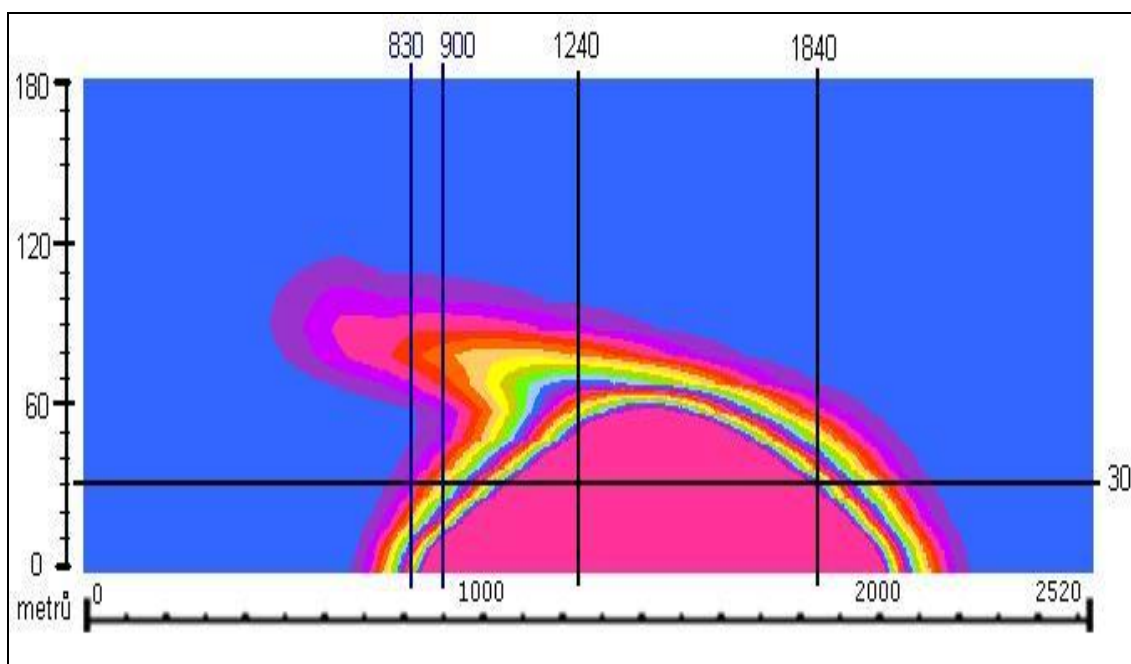
Tab. 3.2: Značení variant úloh podle různých parametrů

(uvedená izotropní hydraulická vodivost  $K$  je nastavena pro poloizolátor).

## 4. Vyhodnocení výsledků

### 4.1 Způsoby vyhodnocení

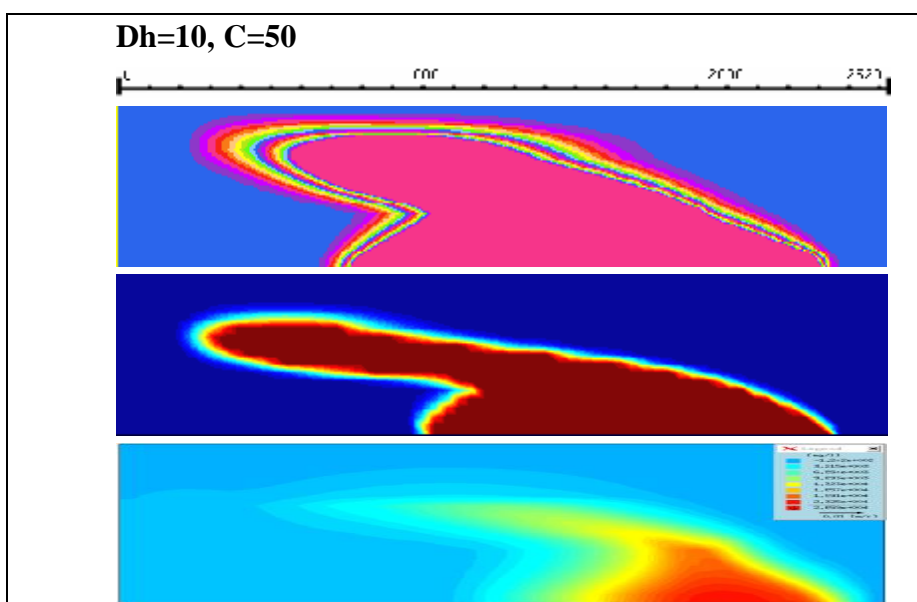
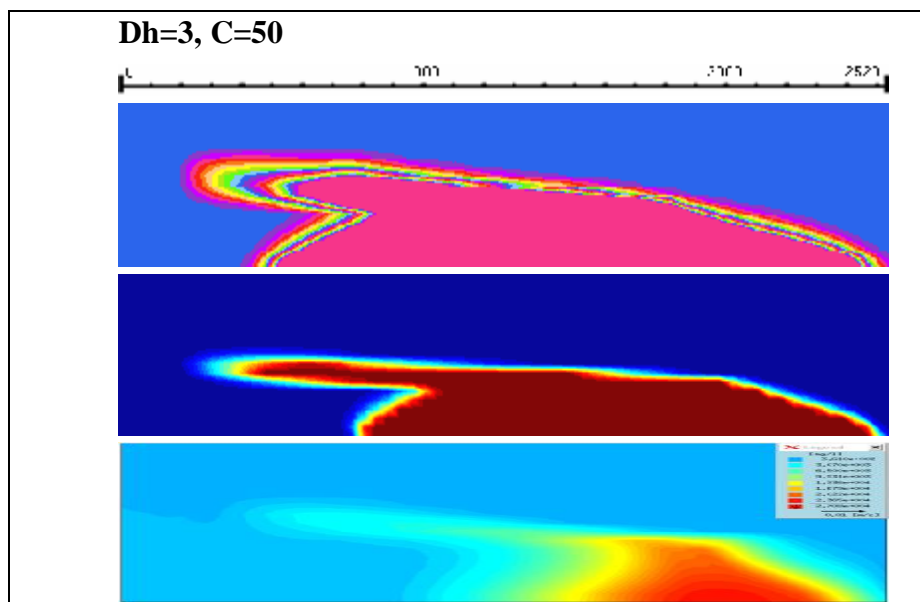
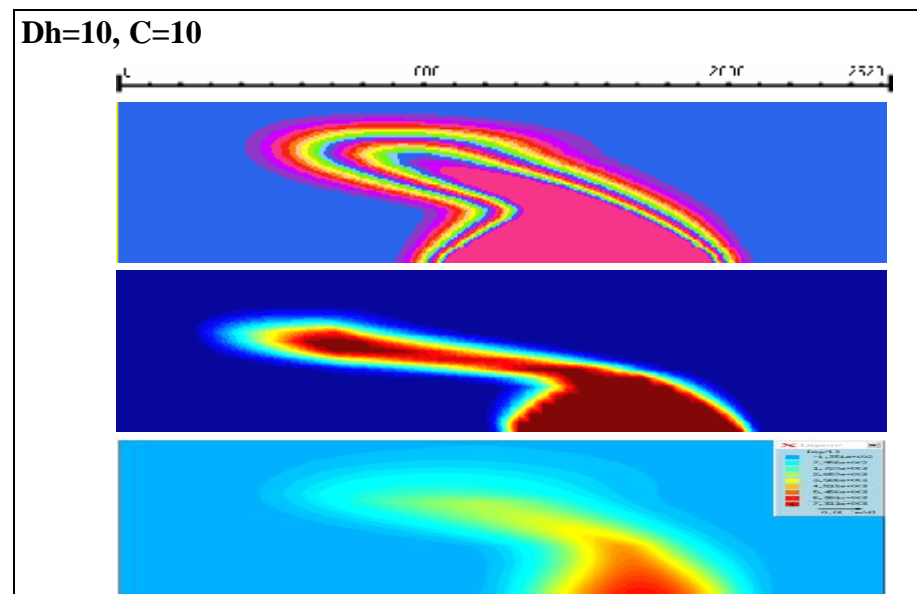
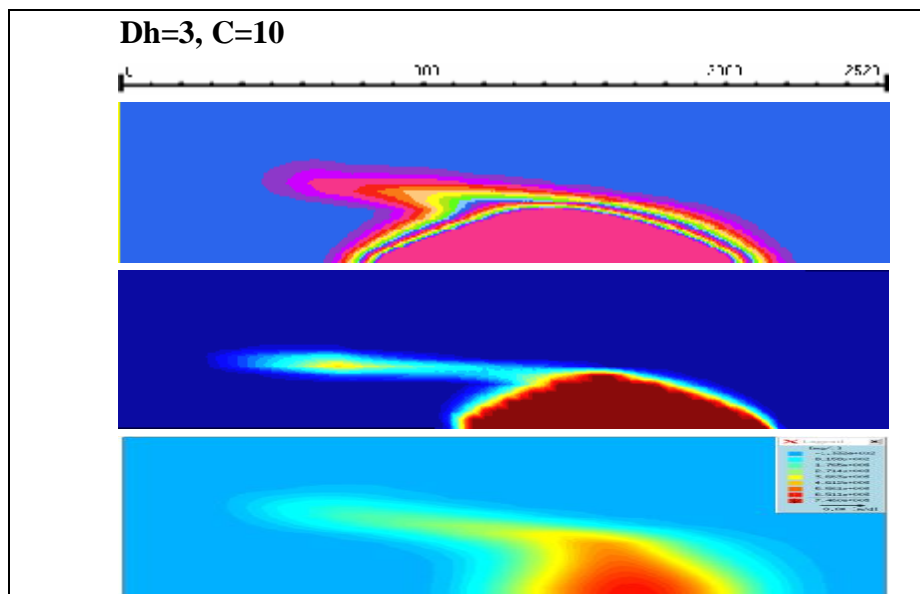
Dosažené výsledky jsou porovnávány v profilech koncentrací a pomocí obrázků s rozložením koncentrací (vizuální srovnání rozložení kontaminačního mraku). Profily jsou použity z důvodu přesnějšího a konkrétního pohledu na úlohu a byly vždy vybírány v závislosti na poloze kontaminačního mraku tak, aby pokryly důležité části plochy s koncentrací. Vyhodnocení chování celé plochy modelu by nebylo technicky ani časově možné. Data svislých i vodorovných profilů, která jsou k vyhodnocování použita, jsou získána buď přímo z výstupního souboru (nastavení profilu probíhá před spuštěním úlohy), jenž daný program generuje, nebo z textových výstupů koncentrací na konci časového intervalu. Data se následně zpracovávají v tabulkovém kalkulátoru. Grafické zobrazení kontaminačního mraku na konci časového intervalu je generováno přímo výpočetním softwarem (FEFLOW) nebo zobrazovacími programy (GMSH pro Flow123D a GWS View pro TranG2004). Pomocí tohoto zobrazení je možno názorně sledovat posun kontaminace, neumožňuje však sledovat detaily.



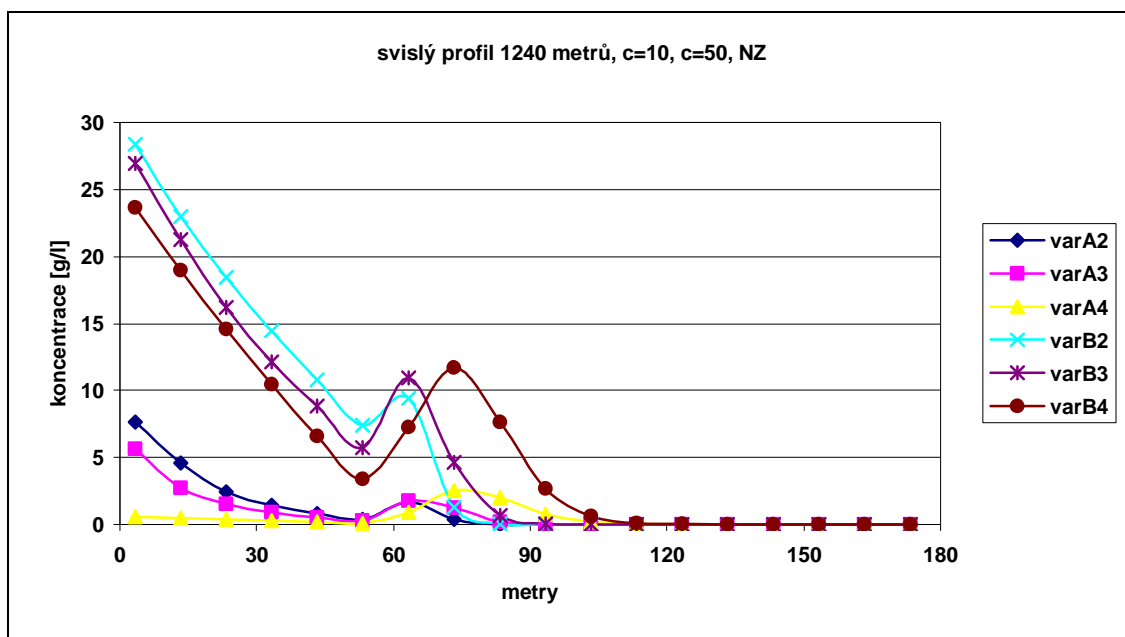
Obr. 4.1: Ukázka rozmístění profilů – svislé profily v souřadnicích  $x = 830$  m,  $x = 900$  m (pro krátký časový úsek) a  $x = 1240$  m,  $x = 1840$  m (pro dlouhý časový úsek), vodorovný profil v souřadnici  $y = 30$  m.

## 4.2 Vliv parametrů na úlohu

Tato podkapitola se zabývá vlivem fyzikálních parametrů (tlakový rozdíl hladin  $dh$  a počáteční koncentrace  $c$ ). Z obr. 4.2 je patrné, že vyšší rozdíl hladin  $dh$  vytlačuje kontaminační mrak do vyšších vrstev. Parametr  $dh$  tedy určuje přítomnost kontaminantu v poloizolátoru. Bude-li  $dh$  dostatečně velké, kontaminace se dostane i do horního kolektoru. Při nastavení vyšších hodnot počáteční koncentrace se kontaminační mrak drží více v dolním kolektoru. Z porovnání obrázků rozložení koncentrací v jednotlivých programech vidíme, že kontaminant v FEFLOW se oproti ostatním programům kumuluje více v dolním kolektoru. Z obrázku 4.3 lze vypožorovat chování těžšího roztoku, kde funkce koncentrace na výšce v profilu u těžšího roztoku (varB2, varB3 a varB4) vlivem gravitace klesá strměji než funkce roztoku s nižší koncentrací. V úlohách s menšími hodnotami  $dh$  (varA2 a varB2) je výsledná koncentrace v daných bodech v dolním kolektoru vyšší než v úlohách s většími rozdíly  $dh$ . Nejnižších hodnot výsledné koncentrace ve spodní části (v cenomanu) je podle očekávání dosaženo u varianty varA4, což je v souladu s pojetím této úlohy jako úlohy s nejmenším vlivem hustoty.

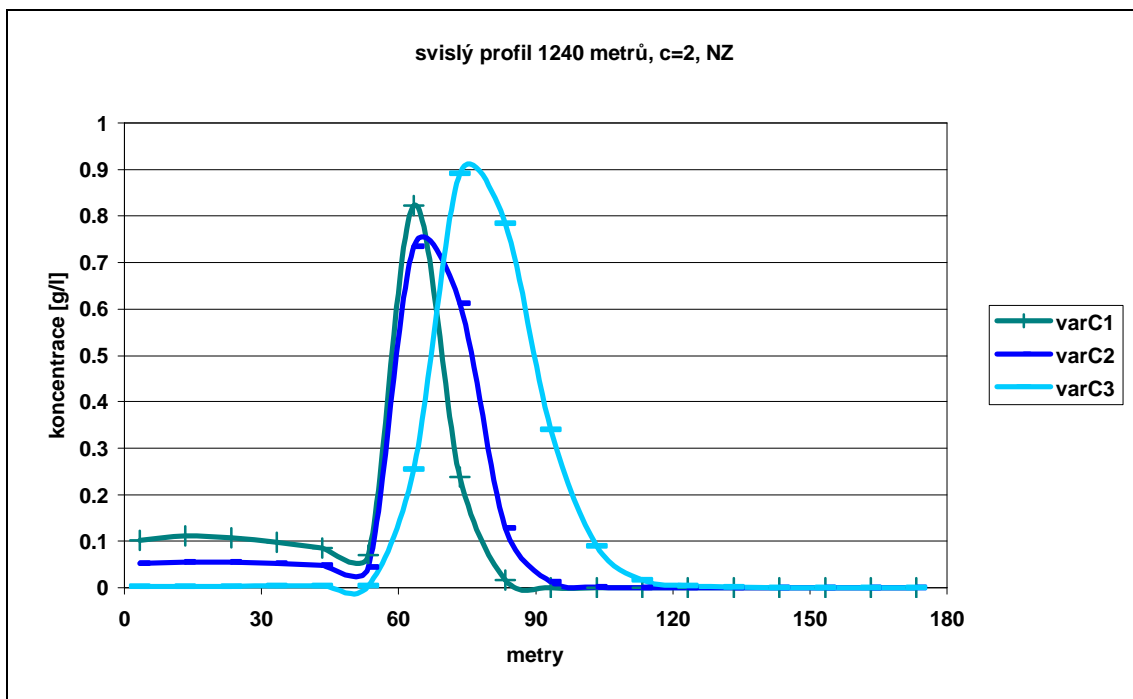


Obr. 4.2: Rozložení kontaminace v čase  $t=100$  let pro různé parametry. Výstupy jsou sestupně z programů TranG, Flow123D a FEFLOW. Nejmenší projevy nehomogenní hustoty jsou u FEFLOW – mrak se více drží v dolním kolektoru.



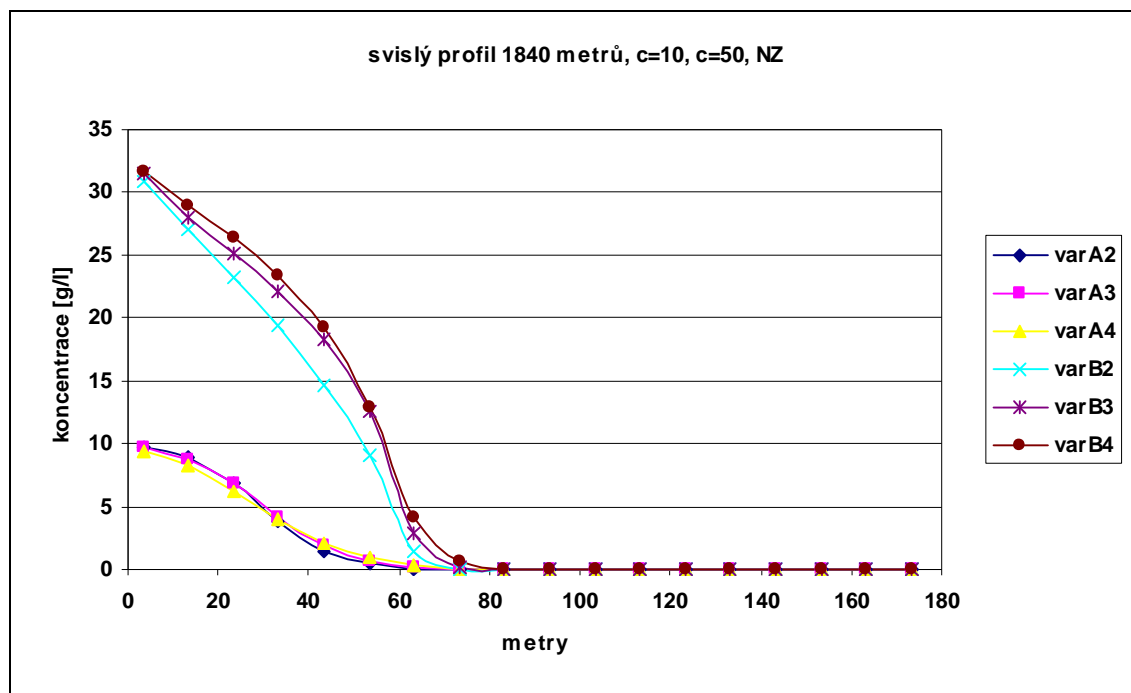
Obr. 4.3: Graf svislého profilu uprostřed modelu ( $x = 1240$  metrů) – funkce koncentrace u těžšího roztoku klesá vlivem gravitace strměji a čím vyšší je  $dh$ , tím vyšší koncentrace je v poloizolátoru.

Ve Flow123D byl proveden test na úlohách blízkých úlohám bez vlivu hustoty. Na následujícím obrázku 4.4 je zřetelný vliv nízké hodnoty počáteční koncentrace. Nejvyšší výsledná koncentrace se nachází v oblasti poloizolátoru. Vyšší rozdíl hladin  $dh$  vytlačuje mrak do vyšších vrstev ve variantě varC3.



Obr. 4.4: Graf svislého profilu uprostřed modelu ( $x = 1240$  metrů) s nízkou počáteční koncentrací, kontaminant proto stoupá do vyšších vrstev

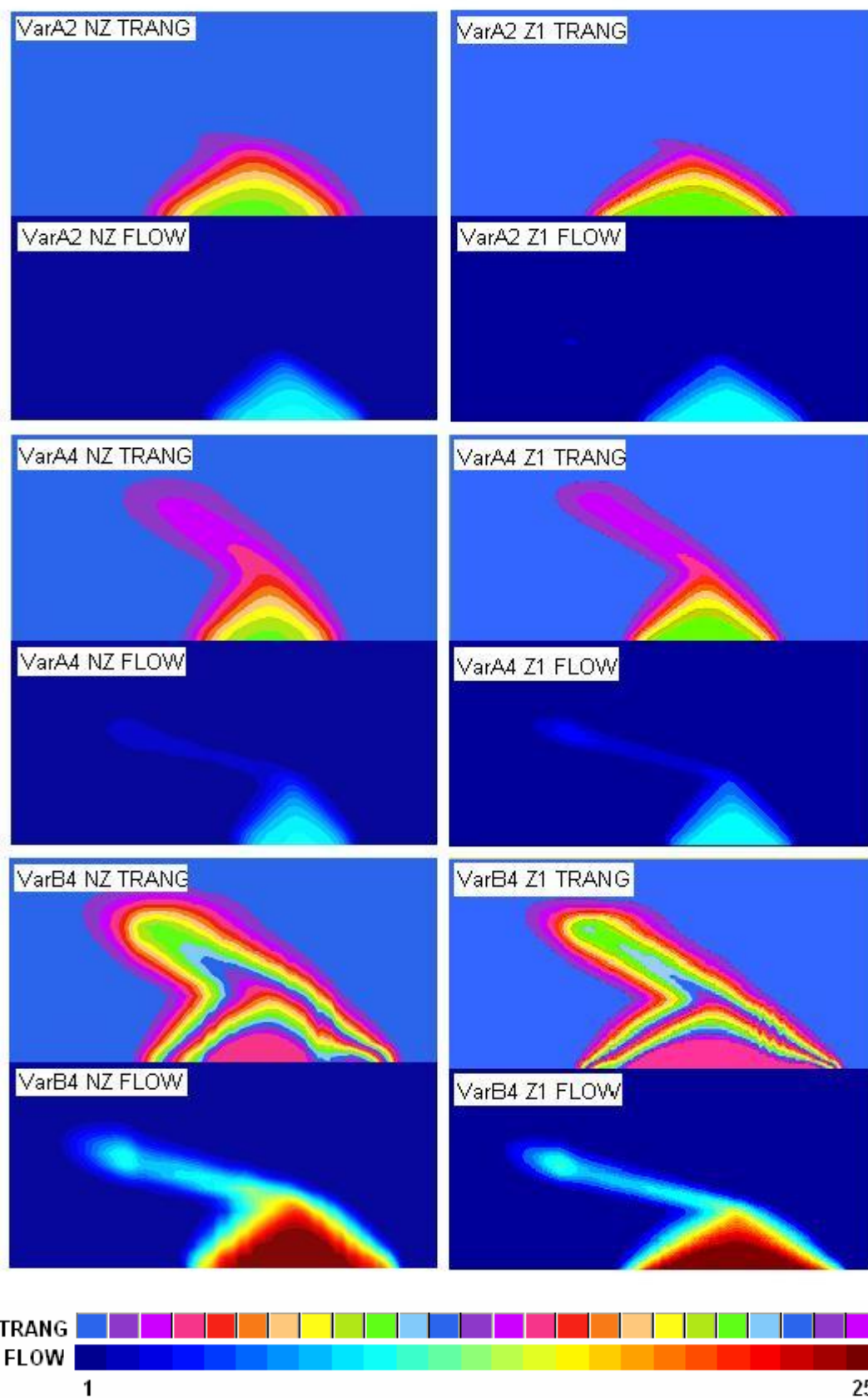
Na obrázku 4.5 profilu v 1840 metrech (pravá část modelu) již nejsou vidět velké rozdíly dané hodnotami  $dh$ . I v těchto malých rozdílech je však patrná změna oproti chování těchto úloh na obr. 4.3. S větší svislou vzdáleností od počátku (1840 m oproti 1240 m) je hodnota koncentrace vyšší ve variantách s vyšším  $dh$ . Rozdíl mezi různými počátečními koncentracemi se zmenšil.



Obr. 4.5: Graf svislého profilu v pravé třetině modelu ( $x = 1840$  metrů) – koncentrace v dolním kolektoru se přibližují, v poloizolátoru je koncentrace velmi nízká (velká vzdálenost profilu od počátku).

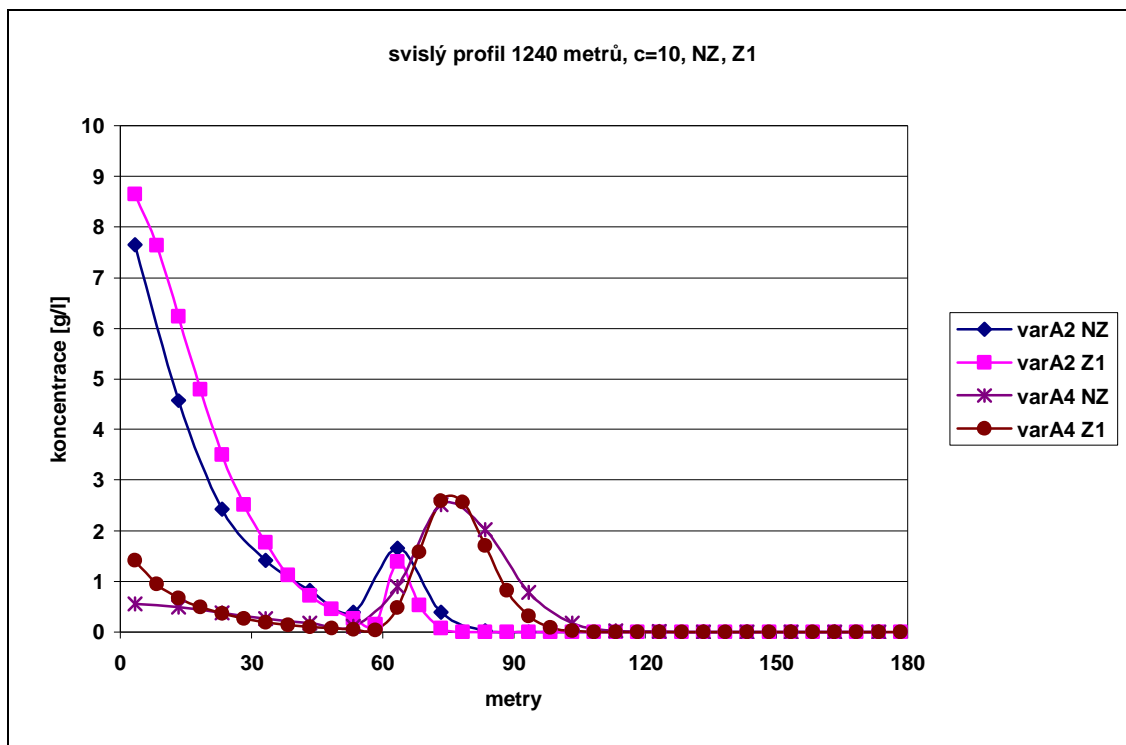
### 4.3 Vliv prostorového zjemnění

Zjemněním úlohy chceme získat věrohodnější informace o chování jednotlivých úloh. V ideálním případě by měla postupná diskretizace vést ke konvergenci k přesnějšímu řešení. V našem případě byla provedena diskretizace z původních obdélníků  $10 \times 40$  m (úlohy NZ) na obdélníky o rozměrech  $5 \times 20$  m (Z1 vznikla dělením NZ na polovinu). Počet elementů v úlohách Z1 je čtyřnásobný oproti úlohám NZ. Vyšší počet elementů s sebou však přináší úskalí v podobě několikanásobně vyšších nároků na výpočetní výkon počítače a numerických chyb. Zjemněním Z1 vzniklo zjemnění Z2 (opět půlením rozměrů). Nároky na výpočet ale byly tak vysoké, že dostupná výpočetní technika (CPU  $2 \times 1,73$  GHz, RAM 2048 MB) na toto zjemnění nestačila a proto pro Z2 vznikly pouze vstupní soubory. Porovnání rozložení kontaminačního mraku mezi nezjemněnou (NZ) a zjemněnou (Z1) úlohou v programech Flow123D a TranG jsou na obrázku 4.6.

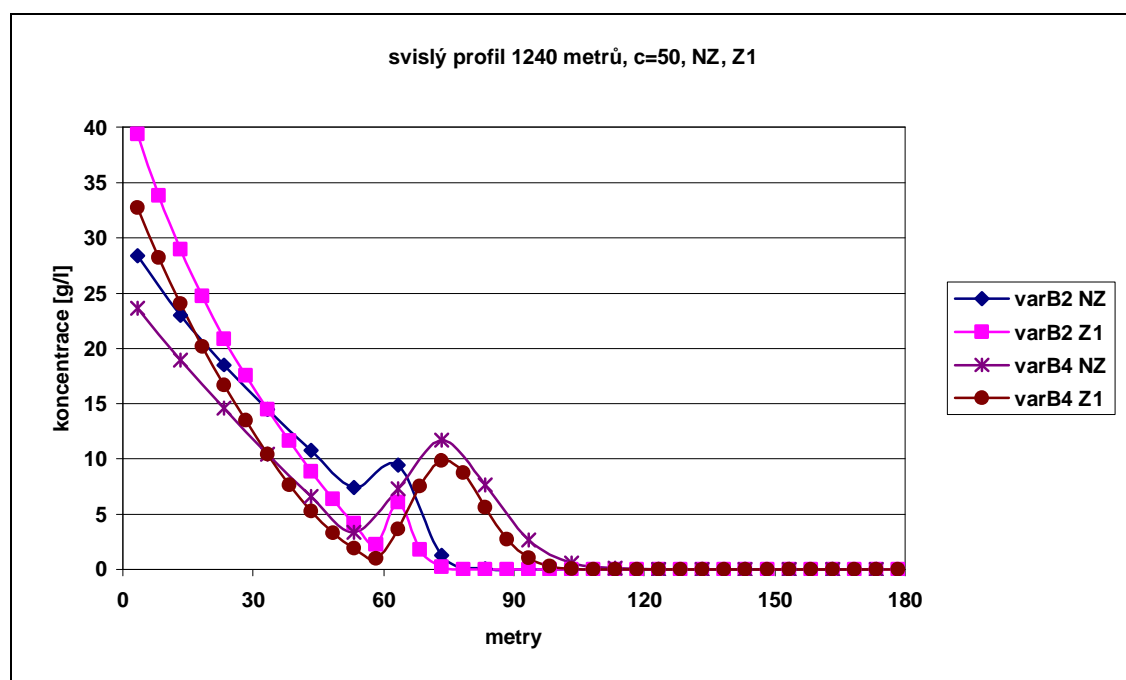


Obr. 4.6: Obrázek porovnávající rozložení kontaminantu ve svislém řezu v programech TranG a Flow123D při nezjemněné a zjemněné úloze.

U zjemněných úloh jsou na obr. 4.6 patrné vyšší hodnoty koncentrací v dolní části modelu, což potvrzují i následující obrázky 4.7 a 4.8.



Obr. 4.7: Graf svislého profilu  $x = 1240$  metrů pro  $c=10$  – koncentrace na počátku (ve svislém směru) je u zjemněných úloh vyšší.

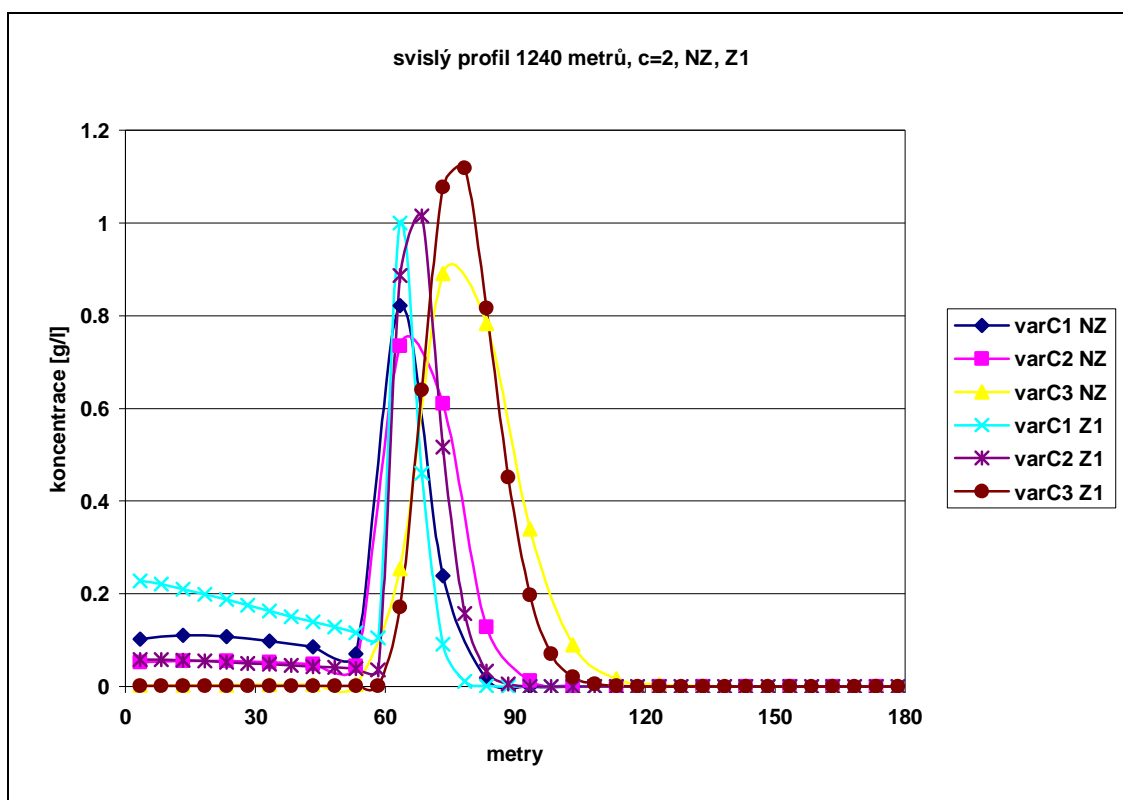


Obr. 4.8: Graf svislého profilu  $x = 1240$  metrů pro  $c=50$  – koncentrace na počátku (ve svislém směru) je u zjemněných úloh opět podstatně vyšší.



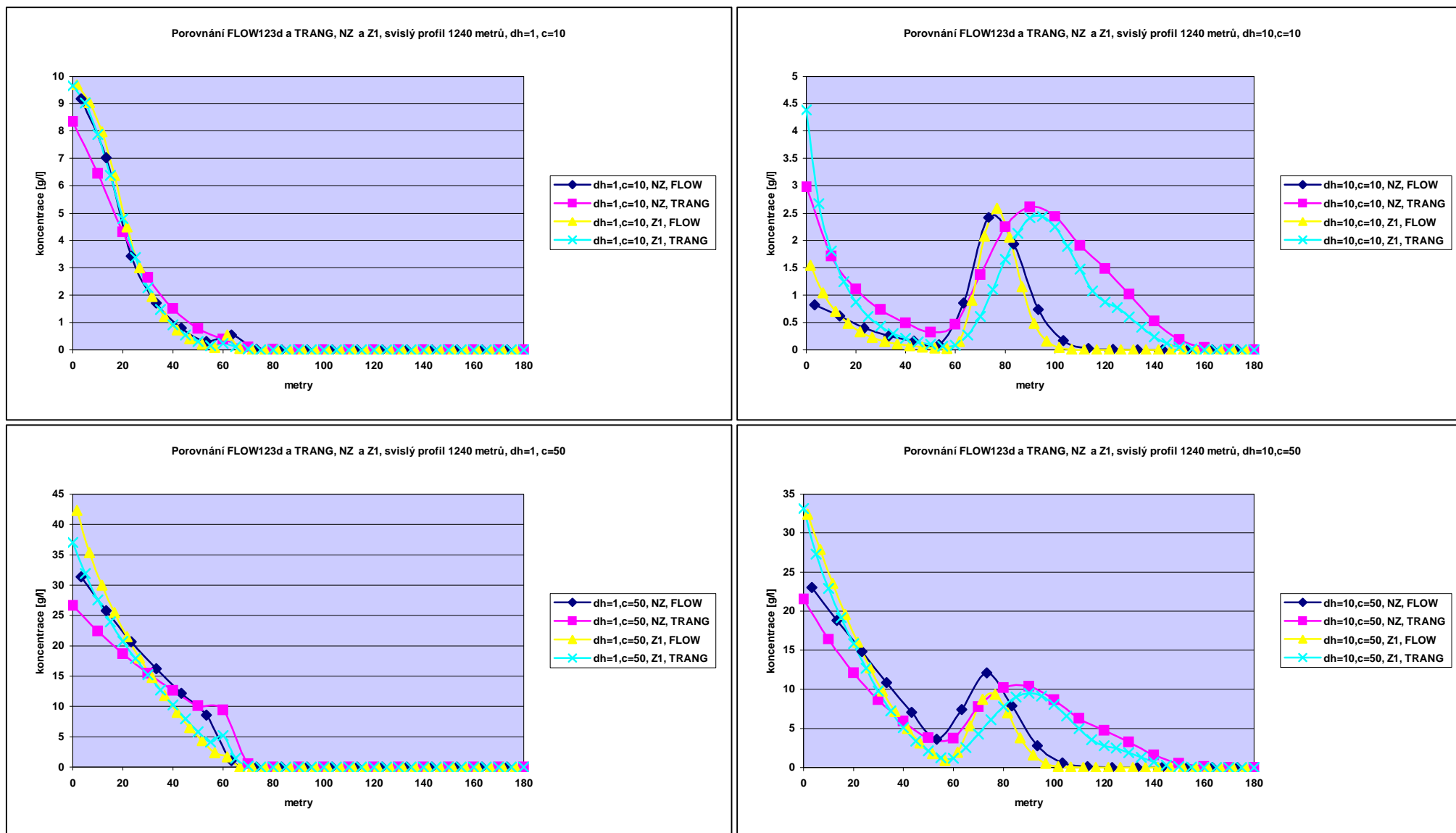
Z obrázků 4.7 a 4.8 lze obecně usoudit, že po zjemnění sítě při počáteční koncentraci 50 g/l dochází k rychlejšímu klesání funkce výsledné koncentrace ve svislém směru. Při nižší počáteční koncentraci (obr. 4.7) má křivka zjemněné úlohy obdobný průběh jako křivka nezjemněné úlohy. V nižších vrstvách je koncentrace vyšší, se zvyšující se svislou vzdáleností klesá. Oba obrázky také ukazují výrazný rozdíl výsledných koncentrací na dně modelu v jeho polovině ve vodorovném směru.

V případě velmi nízké počáteční koncentrace (obr. 4.9) se předchozí jevy neprojevují, pouze u varianty s nejnižší hodnotou  $dh$  je koncentrace na dně modelu vyšší u zjemněné úlohy. Při zadání nízké počáteční koncentrace 2 g/l (malý vliv hustoty) je výsledná koncentrace nejvyšší v oblasti poloizolátoru. Zjemněním sítě je tento trend ještě vyšší (platí pro všechny varianty na obrázku 4.9).



Obr. 4.9: Graf svislého profilu  $x = 1240$  m pro nízkou počáteční koncentraci – při zjemnění se ještě více zvyšuje koncentrace kontaminátu v poloizolátoru.

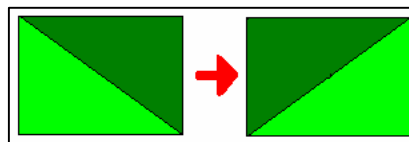
Obrázek 4.10 porovnává zjemněnou a nezjemněnou úlohu mezi programy Flow123D a TranG. Vliv zjemnění se příliš neprojevuje při malém  $dh$  a malé počáteční koncentraci. V dalších variantách již patrný je. Rozdíly mezi Flow123D a TranG jsou při velkém  $dh$  (při jakékoliv počáteční koncentraci) a to především v oblasti poloizolátoru, kde výsledná koncentrace vystoupá v TranG do vyšších vrstev poloizolátoru.



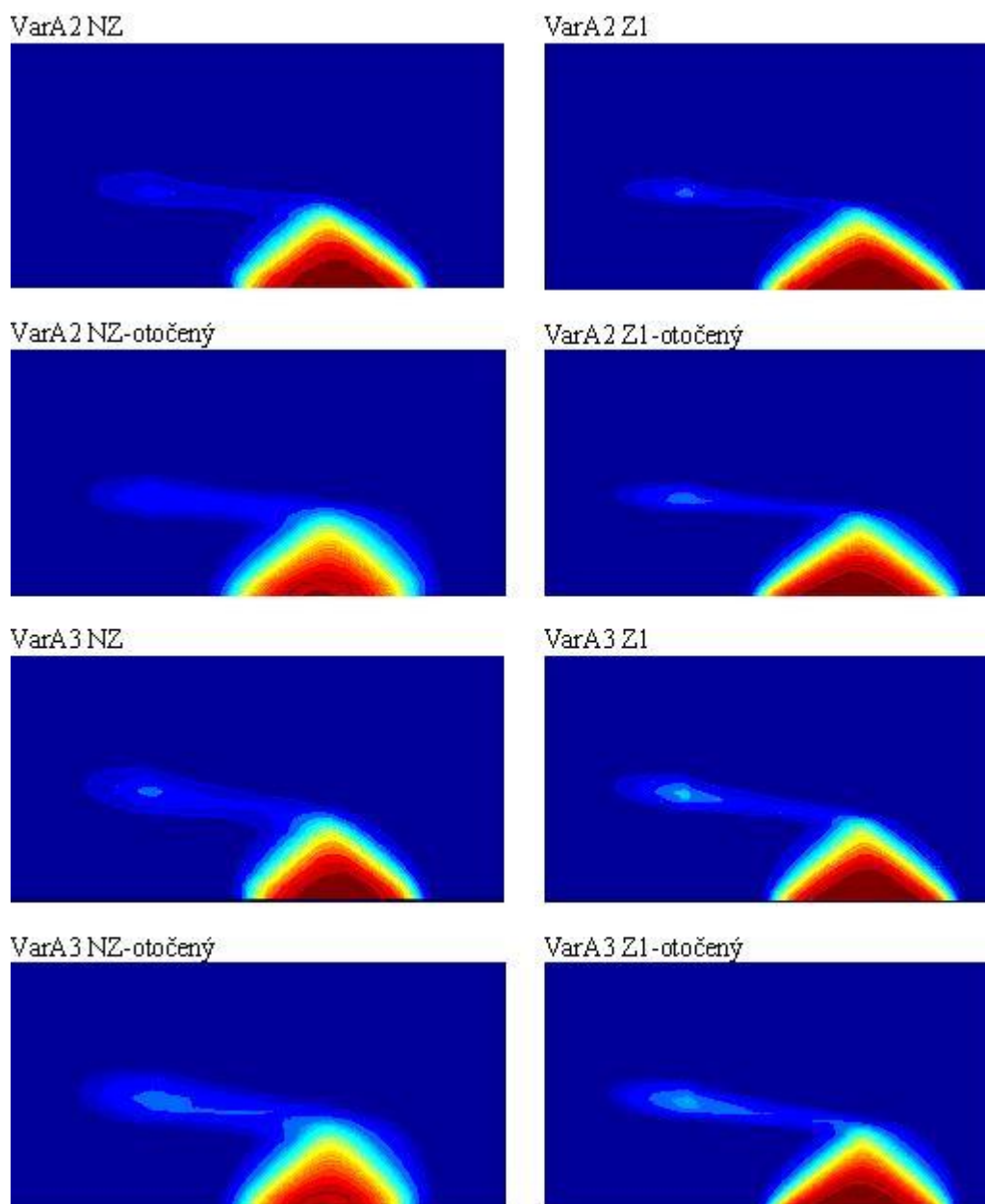
Obr. 4.10: Grafy svislého profilu  $x = 1240$  m (různé parametry) porovnávají programy Flow123D a TranG při zjemněné a nezjemněné úloze.

#### 4.4 Vliv změny geometrie diskretizace

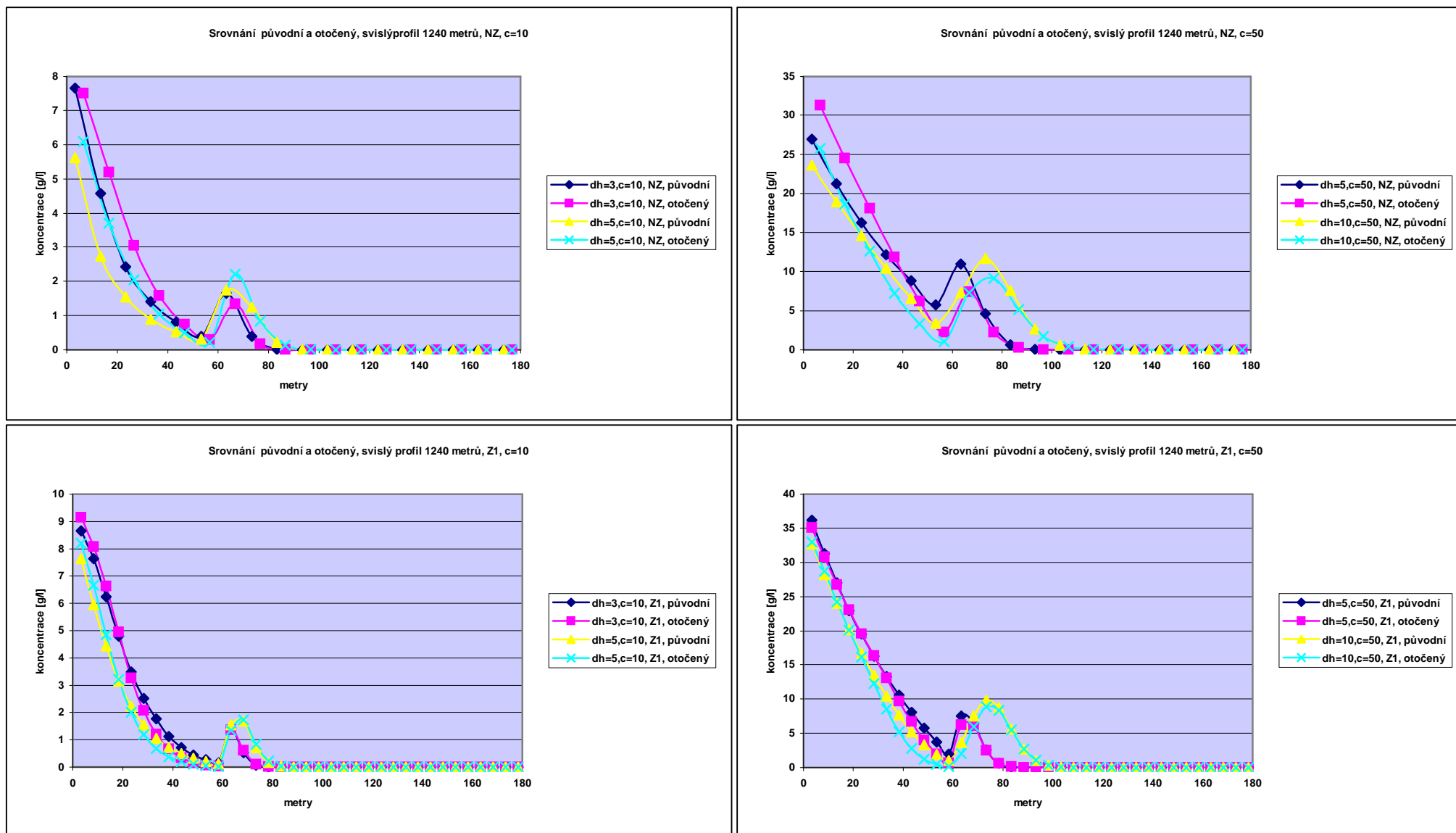
Změnou geometrie diskretizace je myšlena změna orientace elementů otočením podle svislé osy (viz obrázek 4.11). Porovnáním variant úloh s původními a otočenými trojúhelníky (obr. 4.12) je vidět změna tvaru náběhu a konce kontaminačního mraku a rozložení uvnitř mraku.



Obr. 4.11: Změna diskretizace úlohy otočením elementů podle svislé osy.



Obr. 4.12: Porovnání variant s původními a otočenými trojúhelníky. Úlohy s otočenými trojúhelníky mají kontaminační mrak více rozmazaný směrem k pravému boku modelu.



Obr. 4.13: Grafy svislého profilu  $x = 1240$  m (různé parametry), porovnání variant s původními a otočnými trojúhelníky (zjemněné i nezjemněné úlohy).

Na obrázku 4.13 lze vypočítat, že v jemnější síti (zjemněné úlohy Z1) je efekt otočení menší oproti hrubé síti (nezjemněné úlohy NZ), která je na otočení závislá více. To koresponduje s principy numerické diskretizace.

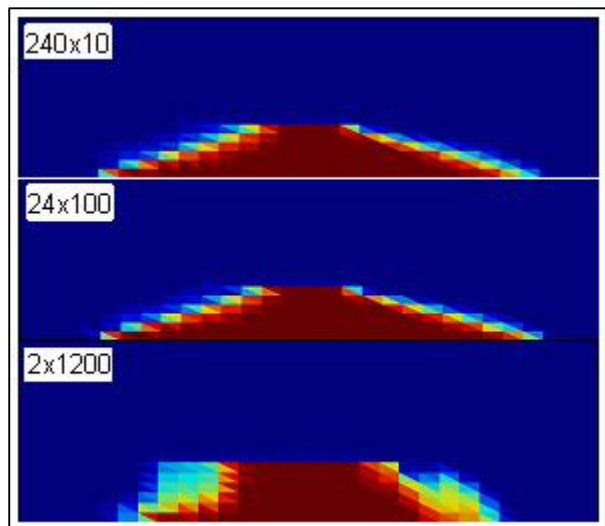
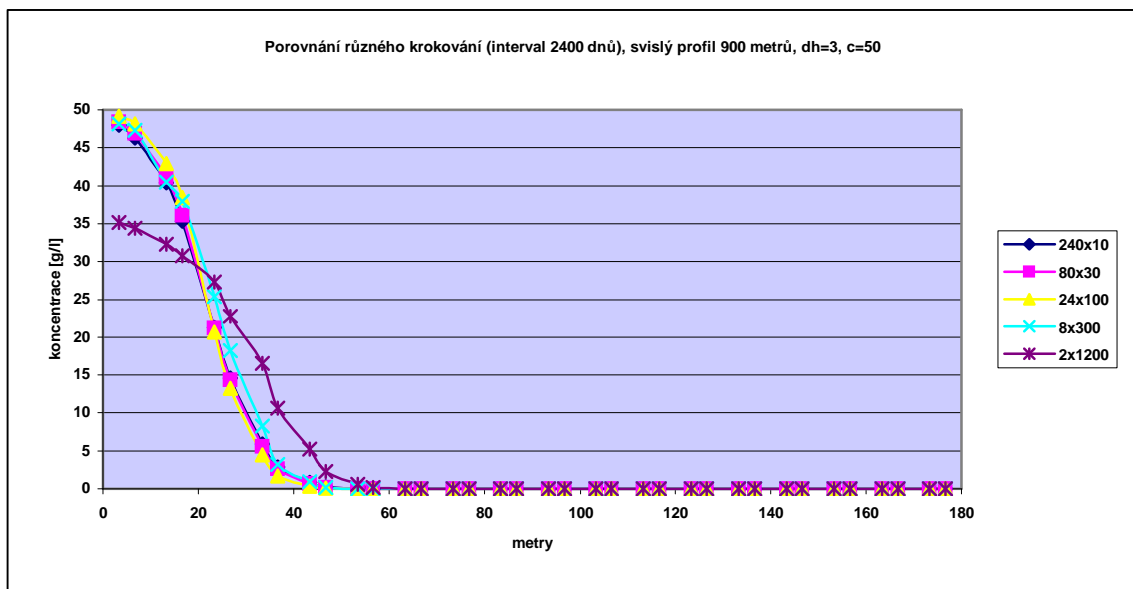
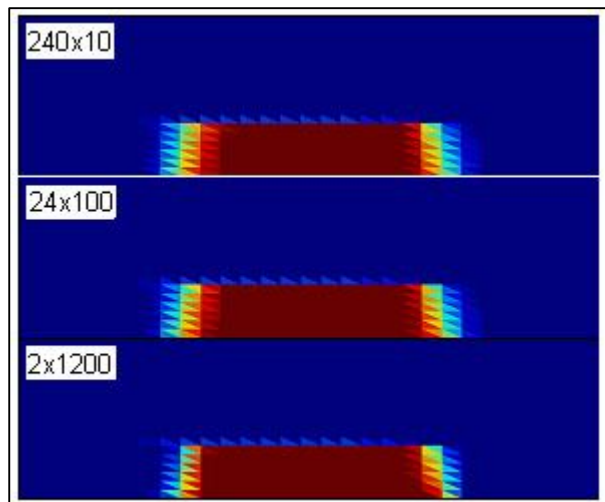
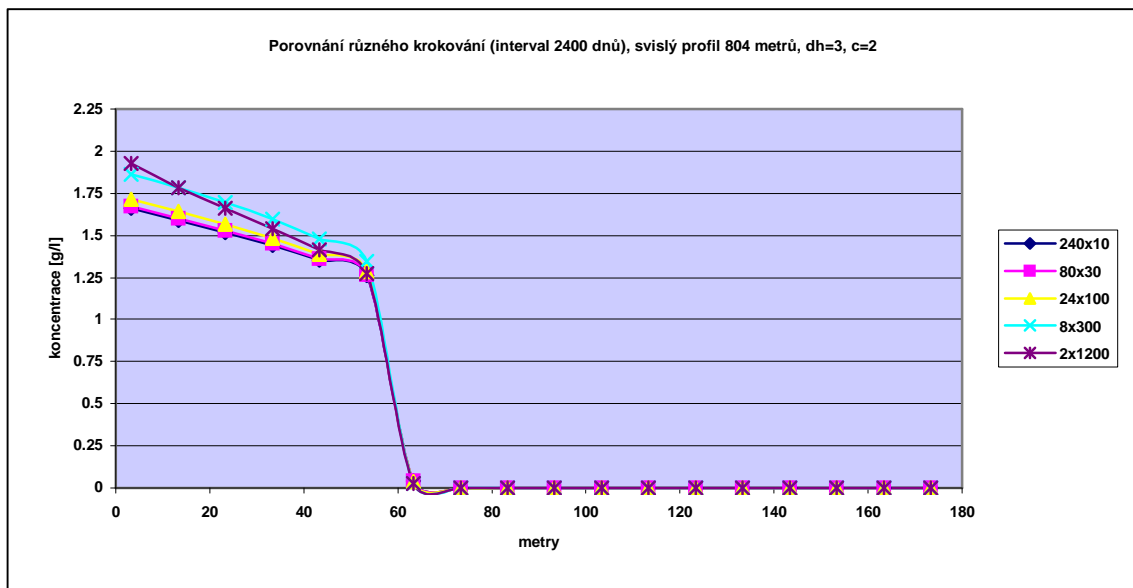
#### 4.5 Vliv časového zjemnění

Výpočty na všech předchozích úlohách byly prováděny na časovém úseku délky 100 let (odpovídá cca 36 000 dnů). Základní časové dělení (krokování) je zvoleno na 40 kroků délky 900 dnů. Zjemněná měla 80 kroků délky 450 dnů (délka nezjemněného kroku byla rozdělena stejně jako elementy na polovinu a počet kroků se zdvojnásobil). V následující části je testováno též větší časové zjemnění, ale kvůli výpočetní náročnosti jen na vzorovém kratším úseku (2 400 dnů). Výpočty na kratším i původním dlouhém úseku (36 000 dnů) jsou prováděny na nezjemněné síti NZ.

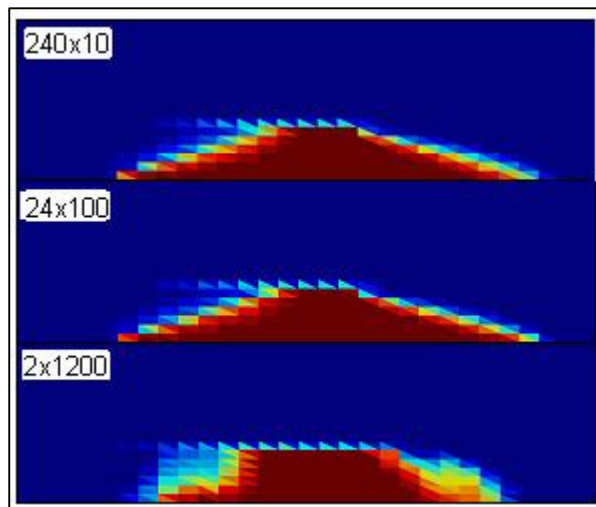
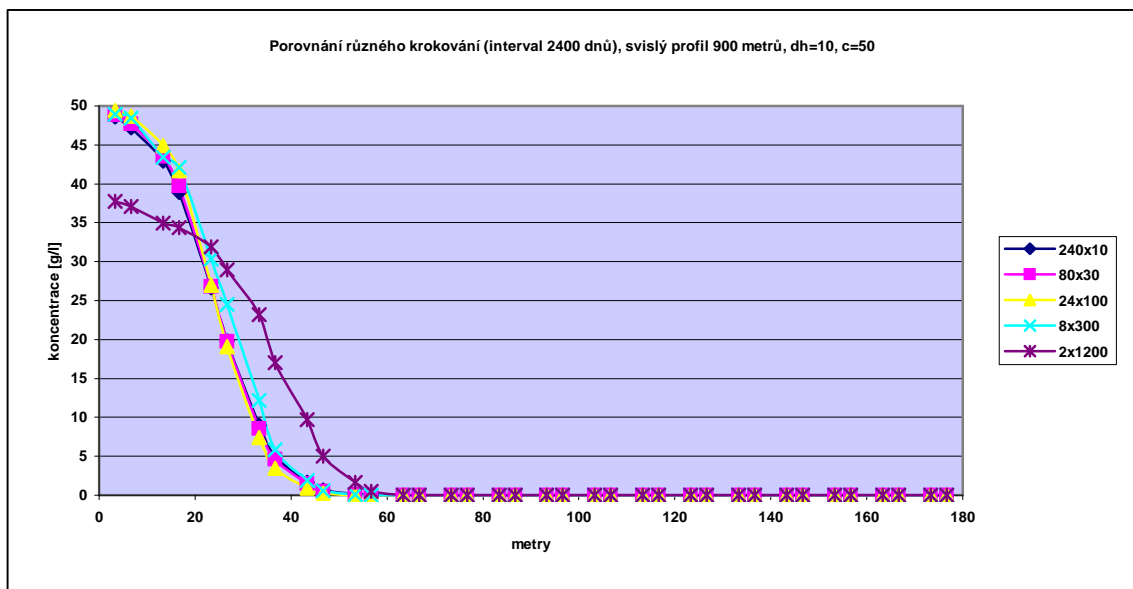
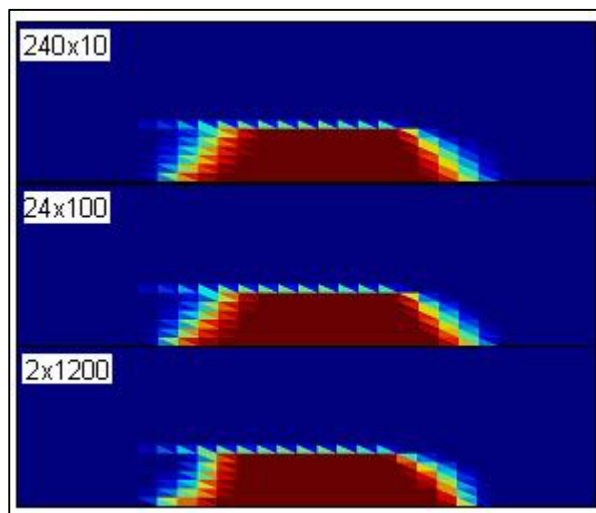
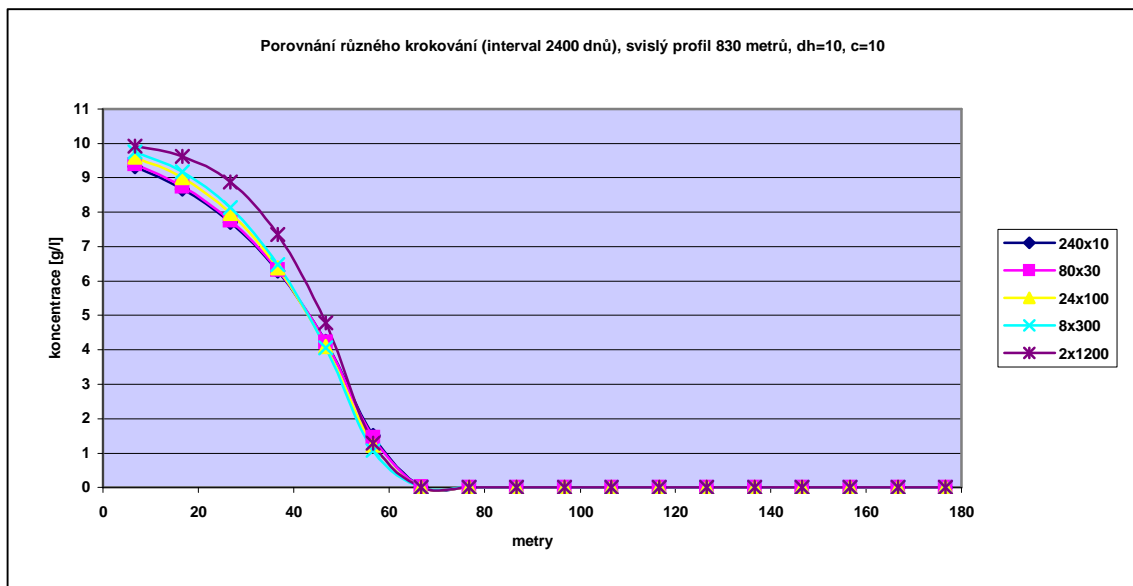
##### 4.5.1 Krátký úsek (2 400 dnů)

Na úseku 2 400 dnů bylo zkoušeno 5 variant délky kroku pro různé kombinace parametrů  $dh$  a počáteční koncentrace. Na obrázku 4.14 jsou uvedeny úlohy s nízkým rozdílem hladin a rozdílnou počáteční koncentrací ( $c_0=2$  g/l,  $c_0=50$  g/l). Vždy je uveden graf (pro všechny varianty krokování a vpravo od něj obrázek rozložení kontaminantu (pro tři vybrané varianty krokování). Spočtená výsledná koncentrace na svislém profilu v 804 metrech je v dolním kolektoru nejvyšší při nejhrubším krokování (8 kroků délky 300 dnů a 2 kroky délky 1 200 dnů). Hodnoty funkce výsledných koncentrací u jemnějších krokování (240 kroků délky 10 dnů, 80 kroků délky 30 dnů a 24 kroků délky 100 dnů) jsou v dolním kolektoru nižší a konvergují k téměř shodnému průběhu. Při vyšší počáteční koncentraci (dolní graf) se od ostatních křivek odchyluje jen nejhrubší krok (patně i na obrázku vpravo od grafu). První graf obecně ukazuje, že při nízké počáteční koncentraci a krátkém časovém úseku nedochází ke změně tvaru kontaminačního mraku (velmi nízký vliv hustoty) a výsledná koncentrace zůstává v dolním kolektoru. Na úloze s velkým vlivem hustoty (malé  $dh$  a velká počáteční koncentrace, horní graf) jsou okraje oblasti kontaminantu méně strmé a dochází k rozmývání kontaminace v dolním kolektoru, kvůli vysoké počáteční koncentraci a malému  $dh$  se koncentrace do poloizolátoru nedostane.

Z obrázku 4.15 lze usoudit (v porovnání s obr. 4.14), že vliv většího rozdílu hladin mezi kolektory není na takto krátkém časovém úseku příliš velký. Co se týká krokování, ideální z těchto variant je 24 kroků délky 100 dnů (věrohodné v porovnání s jemnějším krokováním a relativně výpočetně zvládnutelné).

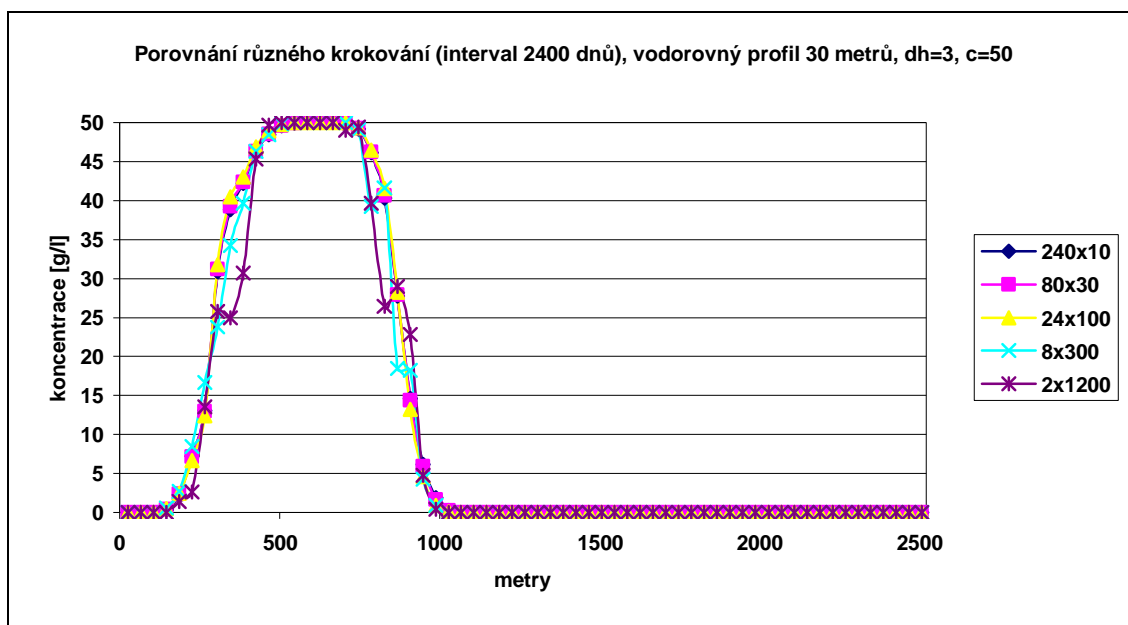


Obr. 4.14: Grafy svislých profilů  $x = 804$  metrů ( $dh=3, c=2$ ) a  $x = 900$  metrů ( $dh=3, c=50$ ) úloh s různým krokováním (počet kroků x délka kroku) na úseku 2400 dnů, obrázky kontaminačního mraku (přísluší vždy k předchozímu grafu).

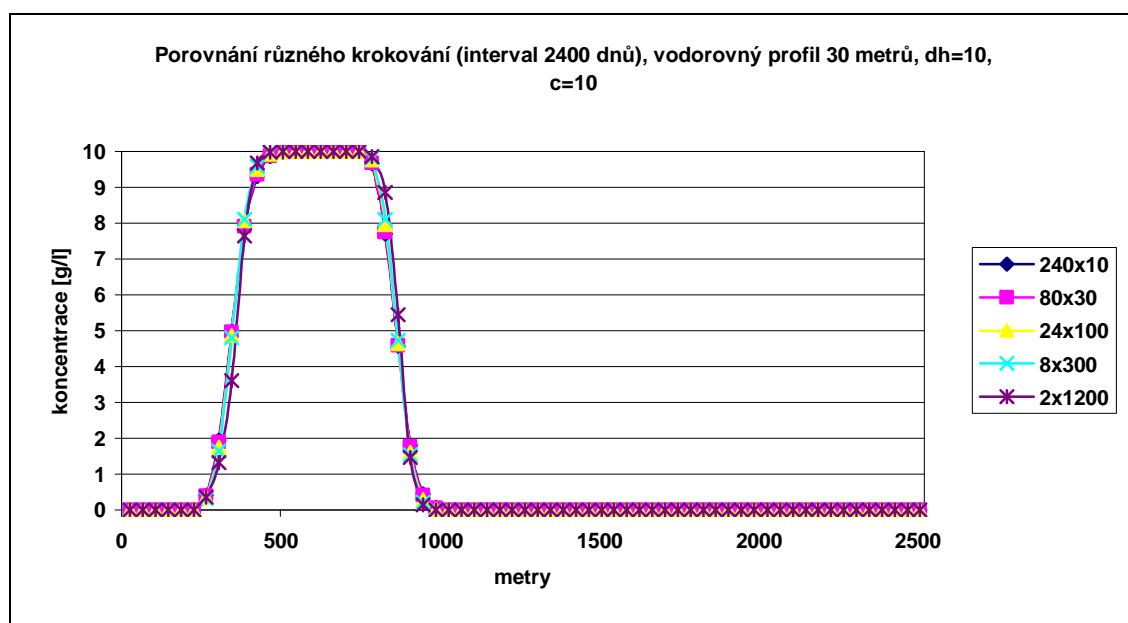


Obr. 4.15: Grafy svislých profilů  $x = 830$  metrů ( $dh=10, c=10$ ) a  $x = 900$  metrů ( $dh=10, c=50$ ) úloh s různým krokováním (počet kroků x délka kroku) na úseku 2400 dnů, obrázky kontaminačního mraku (přísluší vždy k předchozímu grafu).

Obrázky 4.16 a 4.17 znázorňují vlivy různého krokování na chování úloh ve vodorovném profilu výšky 30 metrů (uprostřed dolního kolektoru). Při větším vlivu hustoty (obr. 4.16) se koncentrace více rozprostírá ve vodorovném směru (v porovnání s úlohou s nižším vlivem hustoty na obr. 4.17). Poslední dvě krokování (nejhrubší) se od ostatních liší stejně jako na obr. 4.14 a 4.15. V úloze s menším vlivem hustoty (obr. 4.17) nemá krokování téměř žádný vliv na výsledek.



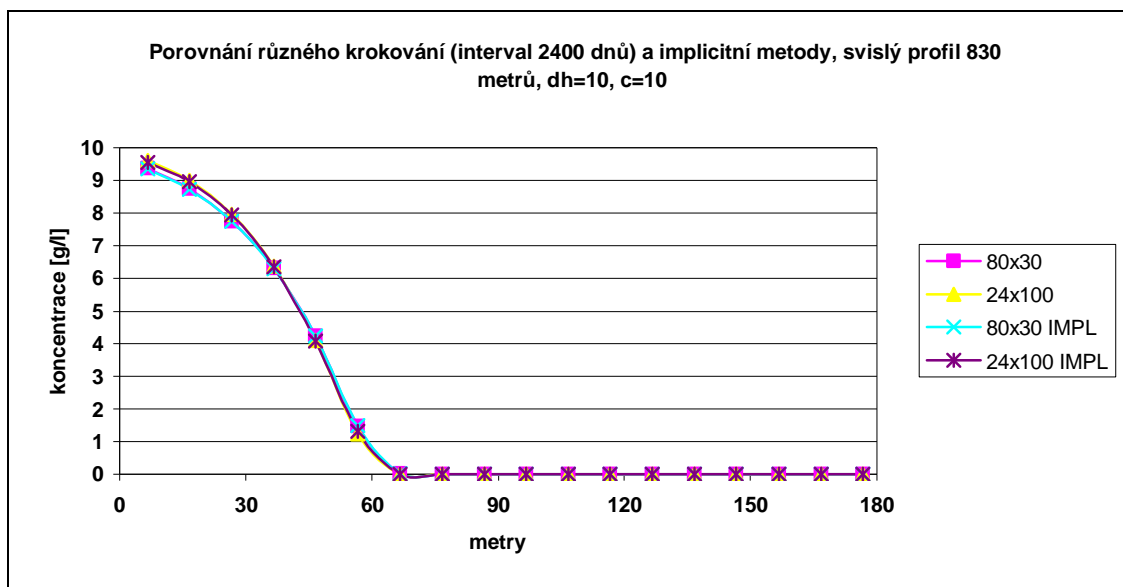
Obr. 4.16: Graf vodorovného profilu  $y = 30$  m ( $dh=3$ ,  $c=50$ ) úloh s různým krokováním (počet kroků x délka kroku) na úseku 2400 dnů. Poslední dvě zjemnění ( $8 \times 300$  a  $2 \times 1200$ ) jsou příliš hrubá.



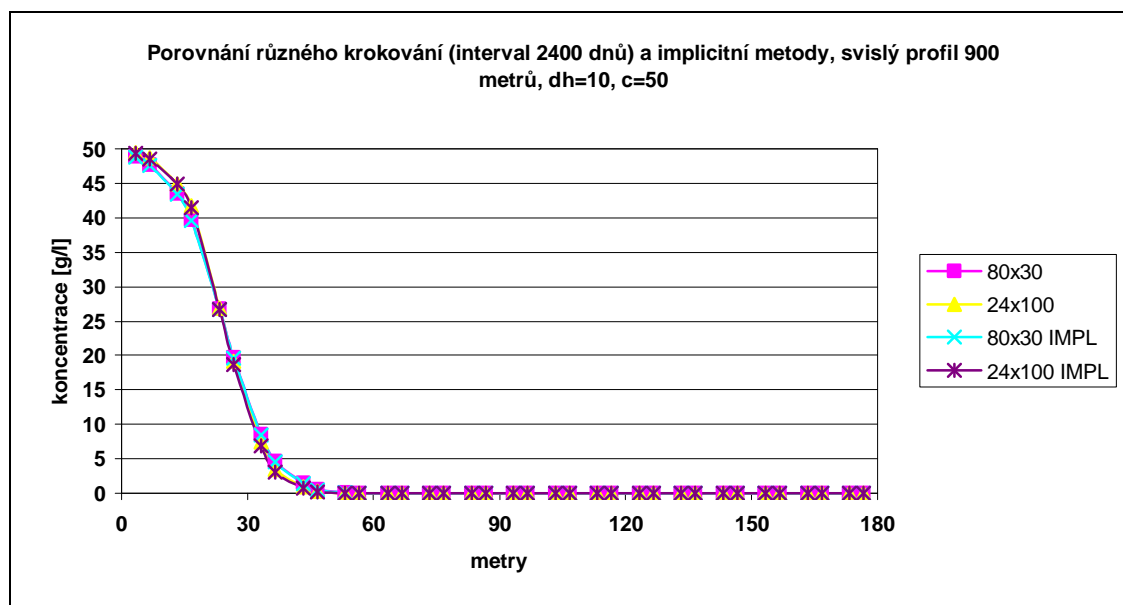
Obr. 4.17: Graf vodorovného profilu  $y = 30$  m ( $dh=10$ ,  $c=10$ ) úloh s různým krokováním (počet kroků x délka kroku) na úseku 2400 dnů. I nejhrubší krokování dává stejný výsledek s ostatními.



Několik úloh v této práci bylo spočteno tzv. implicitní metodou (opakované iterace proudění a transportu až do dosažení konvergence při nastavené odchylce) a posuzoval se rozdíl mezi takto spočtenými úlohami a úlohami spočtenými explicitně. Na následujících obrázcích (obr. 4.18 a 4.19) jsou porovnány dvě úlohy s různým krokováním, počítané vždy explicitní i implicitní metodou. Při zadání různých okrajových a počátečních podmínek jsou křivky úloh spočtených oběmi metodami na krátkém časovém úseku shodné.



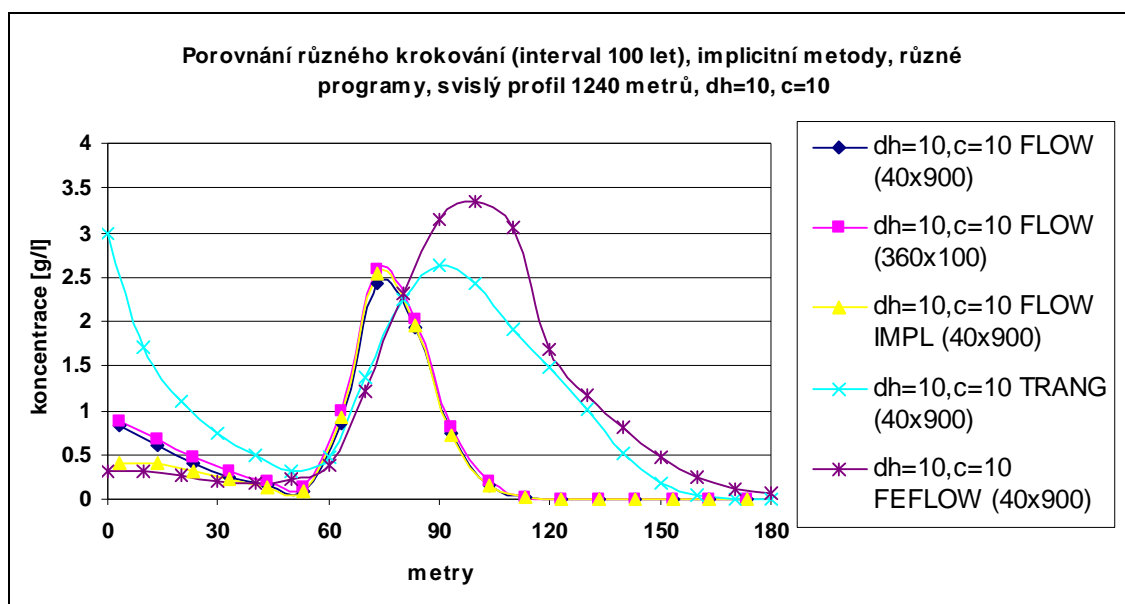
Obr. 4.18: Graf svislého profilu  $x = 830$  m ( $dh=10$ ,  $c=10$ ) porovnávající úlohy počítané standardní a implicitní metodou. Křivky jsou téměř shodné pro obě uvedená krokování.



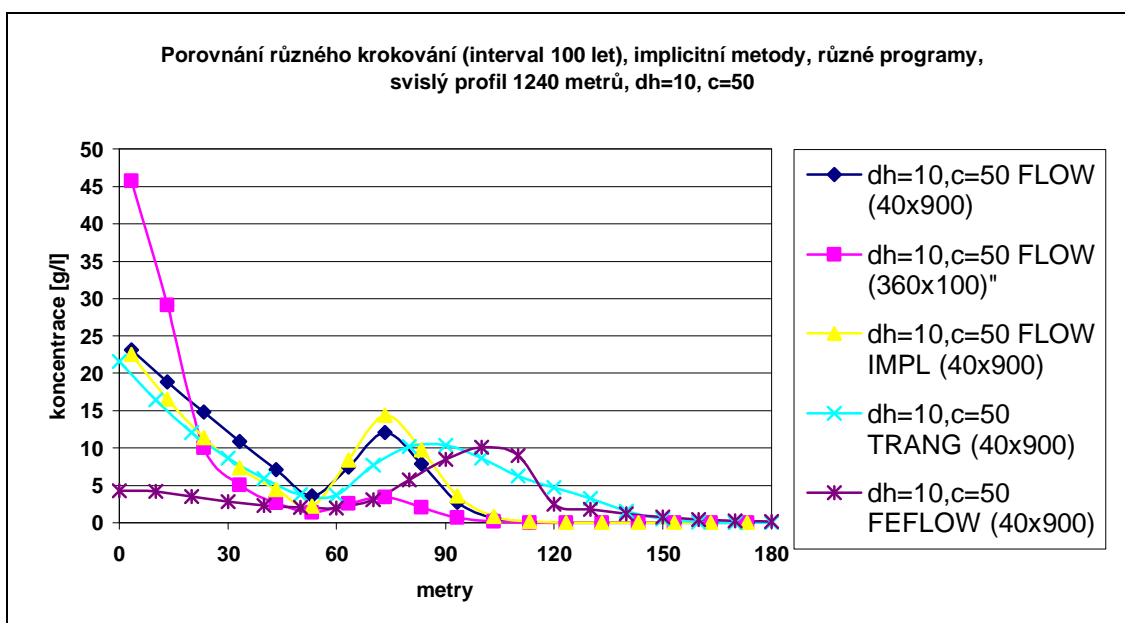
Obr. 4.19: Graf svislého profilu  $x = 900$  m ( $dh=10$ ,  $c=50$ ) porovnávající úlohy počítané standardní a implicitní metodou. Křivky jsou téměř shodné pro obě uvedená krokování.

#### 4.5.2 Dlouhý úsek (36 000 dnů)

Na tomto původním časovém úseku byla provedena jen dvě různá krokování kvůli výpočetní náročnosti úloh (dlouhá doba výpočtu). Porovnávána jsou na obr. 4.20 a 4.21 společně s implicitně spočítanou úlohou s původním krokováním a se stejnými úlohami z programů TranG a FEFLOW (krokování shodné s původním krokováním ve Flow123D). Délka intervalu  $t=100$  let.



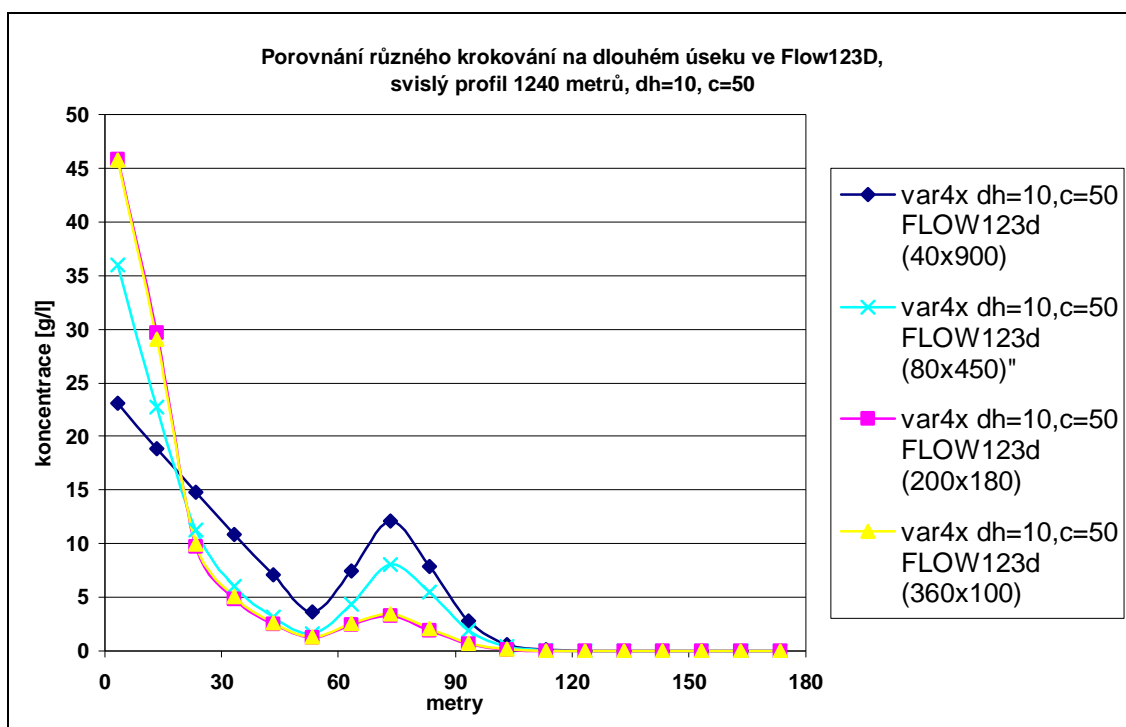
Obr. 4.20: Graf svislého profilu  $x = 1240$  m ( $dh=10, c=10$ ) porovnávající úlohy (s různým krokováním) počítané různými programy s implicitně počítanou úlohou (Flow123D).



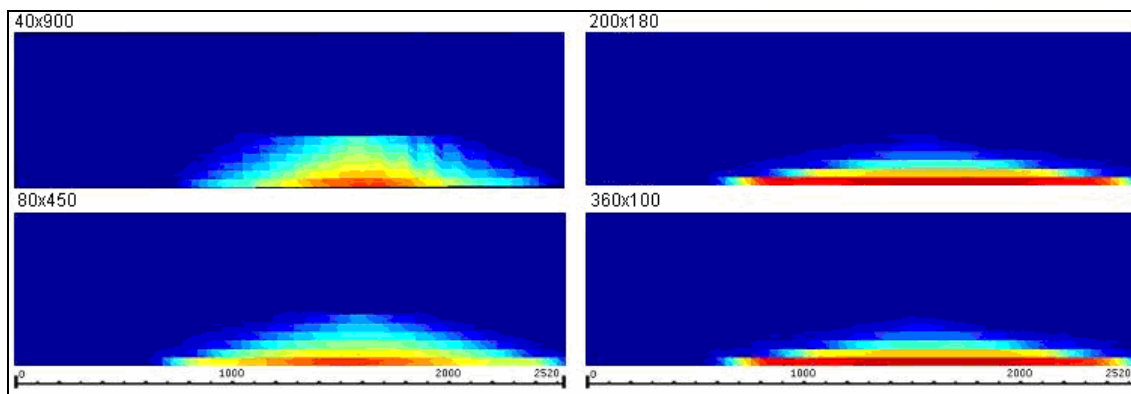
Obr. 4.21 Graf svislého profilu  $x = 1240$  m ( $dh=10, c=50$ ) porovnávající úlohy (s různým krokováním) počítané různými programy s implicitně počítanou úlohou (Flow123D). Délka intervalu  $t = 100$  let.

Na svislém profilu 1240 metrů je při nízké počáteční koncentraci rozdíl mezi různými krokováními ve Flow123D malý. V porovnání s implicitní metodou se liší počáteční koncentrace pouze ve spodní části dolního kolektoru, kde je nižší právě u úlohy počítané implicitní metodou. Při vysoké počáteční koncentraci se od sebe výsledky z obou krokování liší a to zásadně. Při jemnějším krokování je vyšší koncentrace v dolním kolektoru. Hrubším krokováním dosáhneme vyšších hodnot koncentrací kontaminantu v poloizolátoru.

Na následujícím grafu (obr. 4.22) jsou výsledné koncentrace úloh získaných dalším zjemňováním časového kroku úseku 100 let. Je také vidět, jak se postupným zjemňováním časového kroku drží kontaminační mrak více v dolním kolektoru. Při hrubém časovém kroku se naopak kontaminant dostává i do poloizolátoru. Stejně závěry jsou viditelné na obrázku 4.23 a jsou dány velkou citlivostí na diskretizaci časových kroků. Podrobnější analýza těchto závěrů však není předmětem této práce.



Obr. 4.22: Graf svislého profilu  $x = 1240$  m ( $dh=10, c=50$ ) porovnávající různá krokování úlohy na úseku  $t = 100$  let.

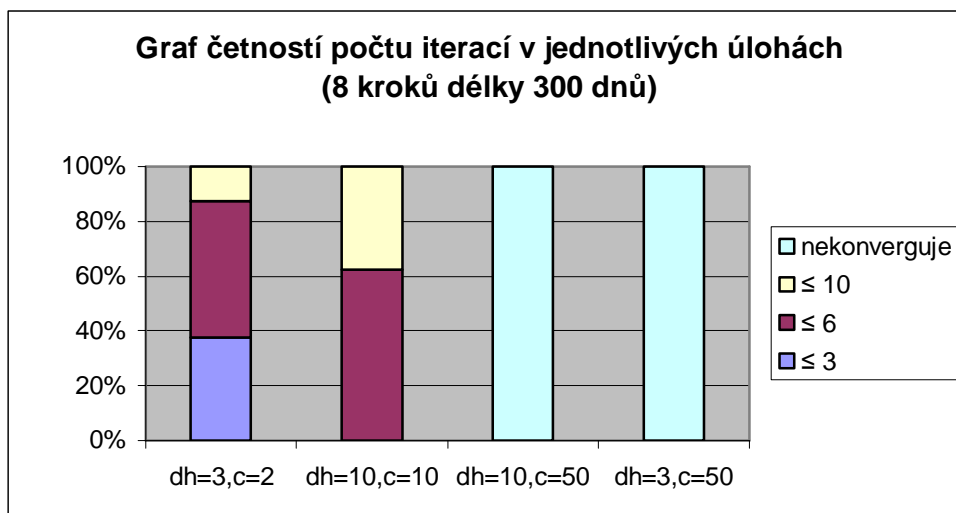


Obr. 4.23: Rozložení kontaminantu ve svislém řezu pro úlohu ( $dh=10, c=50$ ) s různým krokováním na úseku  $t = 100$  let. Při jemnějším krokování zůstává na dně dolního kolektoru.

#### 4.6 Analýza počtu iterací implicitní metody

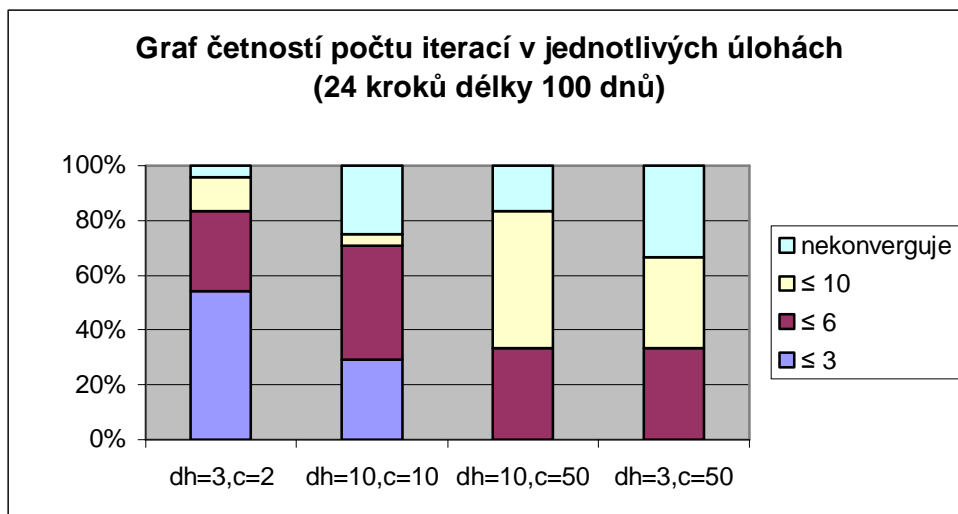
Tato část je věnována porovnání četností počtu iterací při výpočtu úloh na krátkém časovém úseku (viz část 4.5.1) pomocí implicitní metody. Cílem je zjistit, kolik procent kroků jednotlivých úloh zkonvergovalo v daných intervalech počtu iterací v závislosti na fyzikálních parametrech. Maximální počet iterací pro každý krok byl nastaven na hodnotu 10.

Obrázek 4.24 zobrazuje grafy úloh s příliš hrubým krokováním. Úlohy s velkým vlivem hustoty ( $dh=10, c=50$  a  $dh=3, c=50$ ) v tomto případě vůbec nekonvergovaly v námi nastaveném počtu kroků (10).

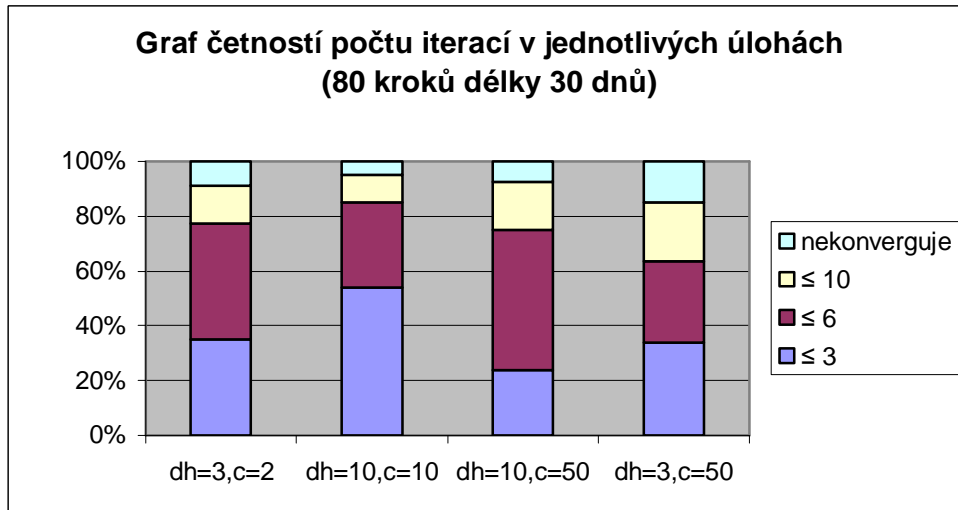


Obr. 4.24: Graf četností počtu iterací v úlohách s různými parametry  $dh$  a  $c$  a hrubým krokováním seřazených podle vlivu hustoty vzestupně zleva doprava. Legenda zobrazuje počet iterací potřebných ke konvergenci.

S postupným zjemňováním krokování (obr. 4.25 a 4.26) se počet kroků iterace snižuje v úlohách s menším vlivem hustoty ( $dh=3, c=2$  a  $dh=10, c=10$ ). Úlohy s velkým vlivem hustoty alespoň částečně konvergují v nastavených deseti iteračních krocích.



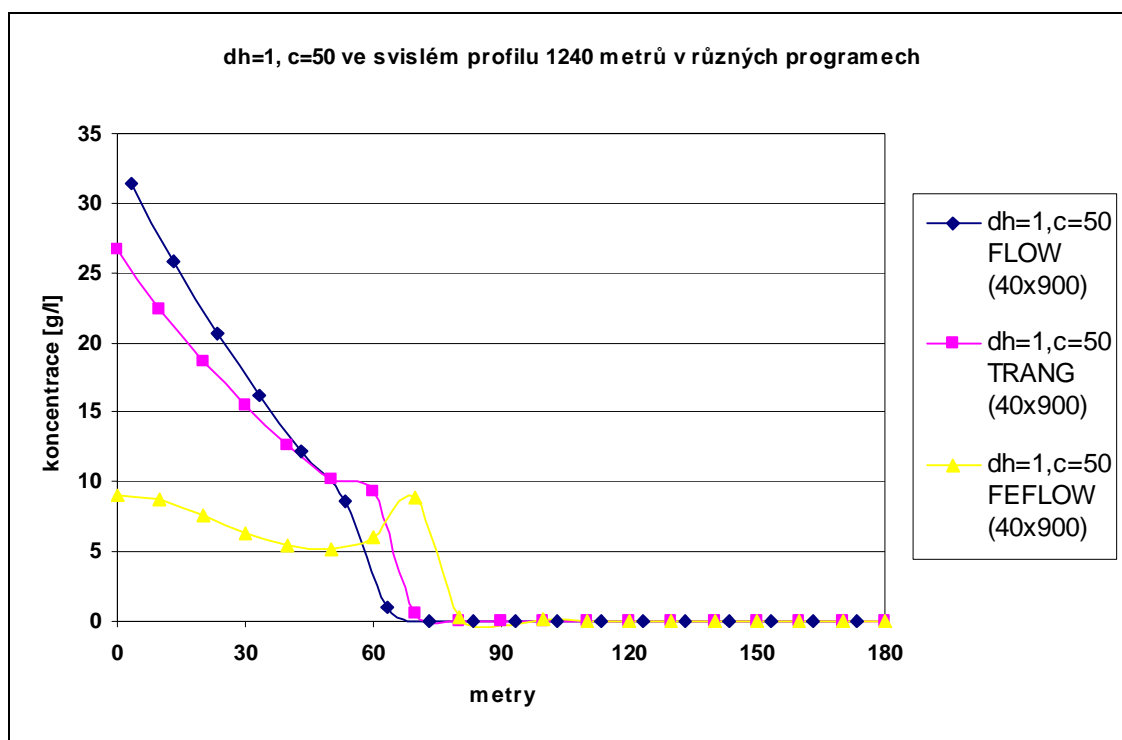
Obr. 4.25: Graf četností počtu iterací v úlohách s různými parametry  $dh$  a  $c$  a jemnějším krokováním seřazených podle vlivu hustoty vzestupně zleva doprava. Legenda zobrazuje počet iterací potřebných ke konvergenci.



Obr. 4.26: Graf četností počtu iterací v úlohách s různými parametry  $dh$  a  $c$  a nejjemnějším krokováním seřazených podle vlivu hustoty vzestupně zleva doprava. Legenda zobrazuje počet iterací potřebných ke konvergenci.

## 4.7 Porovnání softwarů

Součástí práce bylo také porovnání některých výsledků mezi jednotlivými softwary. Shoda mezi programy TranG a FEFLOW ve svislém profilu uprostřed modelu (obr 4.27) není příliš dobrá (stejně jevy na obr. 4.20 a 4.21). Z obrázku 4.27 je vidět nejmarkantnější rozdíl v dolní zvodni, kde výsledky FEFLOW ukazují mnohem menší projevy nehomogenní hustoty v podobě kumulace kontaminace u dolního okraje modelu. Dobré shody je dosaženo mezi TranG a Flow123D ve svislém profilu ( $x = 1240$  metrů) na obr. 4.10 (zjemněné úlohy), na obr. 4.21 a 4.27 (velká počáteční koncentrace 50 g/l). Obrázek 4.20 (počáteční koncentrace 10 g/l) prezentuje dobrou shodu mezi TranG a FEFLOW v části křivky odpovídající poloizolátoru.



Obr. 4.27: Porovnání různých programů v úloze odpovídající většímu vlivu hustoty, rozdíly křivek jsou velké (citlivost programů je větší).

Rozdíly křivek v grafech jsou ovlivněny tím, že profil protne oblast s koncentrací v trochu jiném místě. Velká část rozdílu může být také dána vlastnostmi úloh (např. citlivost daná numerickou difuzí).

Do jisté míry lze z porovnání výsledků programů potvrdit předpoklad, že pro parametry odpovídající většímu vlivu hustoty je citlivost modelových úloh na numerické schéma jednotlivých programů větší než je tomu u úloh odpovídajících menšímu vlivu hustoty.

## Závěr

Bakalářská práce zahrnuje stručný popis horninového prostředí, kde probíhá proudění vod a transport látek, dále základní popisy fyzikální problematiky modelování v podzemních vodách, sestavení modelových úloh, provedení výpočtů různými způsoby v různých programech s odlišnými vstupními parametry. Posledním úkolem bylo porovnání a vyhodnocení dosažených výsledků.

K simulaci byly použity především programy Flow123D a TranG2004. Ve výpočtech s různými vstupními parametry byly potvrzeny očekávané jevy. Funkce výsledné koncentrace roztoku úlohy s vyšší počáteční koncentrací (50 g/l, úloha s větším vlivem hustoty) klesá ve svislém směru ( $x = 1240$  metrů) strměji v porovnání s funkcí roztoku s nízkou počáteční koncentrací (10 g/l) a vyšší rozdíl hladin vytlačuje kontaminant do vyšších vrstev modelu. Při prostorovém zjemnění sítě docházelo ke konvergenci ke správným výsledkům pouze v úlohách s nízkou počáteční koncentrací. Výsledky zjemněných úloh s vyšší počáteční koncentrací byly více zatíženy vlivem numerické difuze. Změna geometrie diskretizace (otočení elementů podle svislé osy) vedla ke změně tvaru náběhu a konce kontaminačního mraku. V jemnější síti (zjemněná úloha) byl efekt otočení menší než v hrubé síti. Dále byl vyhodnocován vliv jemnosti časového krokování na krátkém a dlouhém časovém úseku. Bylo zjištěno, že zjemňování počtu kroků má výrazný vliv na chování úlohy a dostatečné časové zjemnění krátkého i dlouhého intervalu vede ke konvergenci úloh ke správným výsledkům. Nakonec byla testována implicitní metoda, kde se nastavil počet iterací, během kterých by měl výpočet konvergovat. Na krátkém časovém úseku byly křivky úloh počítaných implicitně a explicitně při stejných počátečních parametrech shodné. Na dlouhém časovém úseku se implicitní metoda v porovnání s explicitní projevila nižší koncentrací u dna dolního kolektoru.

Ve výše uvedených závěrech bylo vyzníváno, že model je velmi citlivý na zjemnění sítě a jemnost časového zjemnění. Potvrdilo se, že ve složitější úloze (velká počáteční koncentrace – větší vliv hustoty) se více projevuje vliv diskretizace modelu, což je dáno složitostí úlohy. Abychom dospěli k závěrům, které by věrohodněji popsaly reálné podmínky, musela by být provedena další zjemnění, která však v námi používaném softwaru nebyla možná z důvodu vysokých výpočetních nároků.

## Literatura

- [1] O. Kolditz, H.J. G. Dierisch: Variable-density flow and transport in porous media: approaches challenges, *Advances in Water Resources*, Vol. 25, pp. 899-944, 2002
- [2] Bear, Verruijt: *Modeling Underground Flow and Pollution*, Reidel Pbl., 1990.
- [3] M. Hokr, J. Mužák: Influence of density-dependent flow and transport processes in the Stráž pod Ralskem area, In *EUROCK 2005 - Impact of the human activity on the geological enviroment* (P. Konečný, ed.), A.A. Balkema, Leiden, The Netherlands, 2005, pp. 191-196
- [4] M. Špetlák: Vyhodnocení benchmarkové úlohy pro proudění s nehomogenní hustotou, *Bakalářská práce*, TUL, 2007
- [5] L. Tannert: Vyhodnocení benchmarkové úlohy pro proudění s nehomogenní hustotou, *Ročníkový projekt*, TUL, 2007
- [6] M. Hokr: Poznámky k přednáškám z předmětu Transportní procesy, učební text FM TUL, 2005
- [7] Ch. Geuzaine, J.F. Remacle: GMSH – reference manual. URL: <http://geuz.org/gmsh>
- [8] Uživatelská dokumentace k programům Flow123D, TranG2004, GMS



# Přílohy

## Struktura DVD

Součástí bakalářské práce je DVD obsahující vstupní a výstupní soubory jednotlivých úloh (pro různé způsoby výpočtů), spouštěcí soubory programu Flow123D a veškeré výsledky. DVD je rozděleno na následující adresáře:

### § FLOW:

Obsahuje vstupy, výstupy a spouštěcí soubory programu Flow123D a srovnání výsledků.

- PROGRAMY – soubory pro spuštění Flow123D
- NZ, Z1, Z2 (dlouhý úsek) – adresář se vstupy a výstupy prostorově zjemněných úloh počítaných na úseku 36 000 dnů (data programu)
- NZ, Z1 (dlouhý úsek, otočené elementy) – adresář se vstupy a výstupy prostorově zjemněných úloh se změněnou geometrií prostorové diskretizace (otočené elementy) na úseku 36 000 dnů (data programu)
- NZ (krátký úsek) – adresář se vstupy a výstupy úloh počítaných na úseku 2 000 dnů (data programu)
- NZ (krátký úsek, implicitní metoda) – adresář se vstupy a výstupy úloh počítaných implicitní metodou na úseku 2 000 dnů (data programu)
- VÝSLEDKY – adresář s výsledky z programu Flow123D (soubory XLS)

### § SROVNÁNÍ FLOW, TRANG, FEFLOW:

Obsahuje srovnání výsledků mezi jednotlivými programy (Flow123D, TranG2004, FEFLOW) v souborech XLS .

### § ELEKTRONICKÁ VERZE BP